(19)日本国特許庁(JP)　(12)公表特許公報(A)　(11)特許出願公表番号
特表2013-513541
(P2013-513541A)
(43)公表日　平成25年4月22日(2013.4.22)

(51)Int.Cl.		F I			テーマコード（参考）
C01B 3/00	***(2006.01)***	C01B	3/00	B	3E172
F17C 11/00	***(2006.01)***	F17C	11/00	C	4G140
C01B 3/26	***(2006.01)***	C01B	3/26		

審査請求 未請求　予備審査請求 未請求　（全 49 頁）

(21)出願番号　特願2012-543343 (P2012-543343)
(86)(22)出願日　平成22年12月14日 (2010.12.14)
(85)翻訳文提出日　平成24年8月6日 (2012.8.6)
(86)国際出願番号　PCT/US2010/060359
(87)国際公開番号　WO2011/081949
(87)国際公開日　平成23年7月7日 (2011.7.7)
(31)優先権主張番号　61/286,104
(32)優先日　平成21年12月14日 (2009.12.14)
(33)優先権主張国　米国 (US)

(71)出願人　508032284
カリフォルニア　インスティチュート　オブ　テクノロジー
アメリカ合衆国，カリフォルニア州　９１１２５，パサデナ，イースト・カリフォルニア・ブールヴァード　１２００，エム／シー　２０１－８５
(71)出願人　506214909
セントル　ナショナル　ドゥ　ラ　ルシェルシュ　シアンティフィック
フランス国　７５７９４　パリ　セデックス　１６　リュ　ミッシェル　アンジュ　３
(74)代理人　100147485
弁理士　杉村　憲司

最終頁に続く

(54)【発明の名称】水素の貯蔵及び／又は発生

(57)【要約】
適当な溶媒中に電子供与体及び電子受容体を含んだ水素貯蔵及び／又は発生配合及び組成物、並びに、水素を貯蔵及び／又は発生させるための関連する方法及びシステム。
【選択図】図２

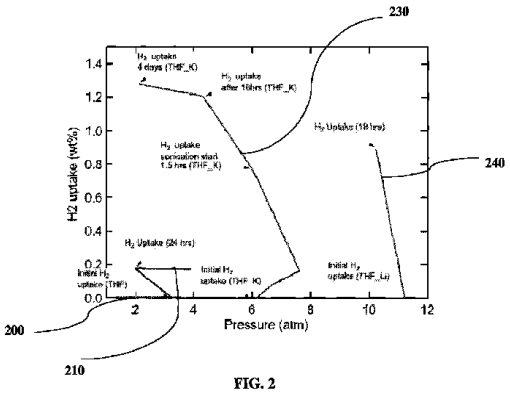


FIG. 2

【特許請求の範囲】
【請求項１】
溶媒中に、電子供与金属を含んだ電子供与体と、多環式芳香族炭化水素及び／又は有機ラジカルを含んだ電子受容体とを含み、
前記電子供与金属が、アルカリ金属、アルカリ土類金属、ランタニド金属、ホウ素族の金属、半金属及び／又はそれらの合金を含み、
前記電子供与金属を含んだ前記電子供与体の少なくとも一部が、前記溶媒に溶解し、それによって、水素と反応して前記溶媒中に水素を貯蔵することのできる化学種を発生させる水素貯蔵配合。
【請求項２】
前記電子受容体が、多環式芳香族炭化水素を含み、
前記化学種が、電子供与金属イオン及び溶媒和電子を含む、請求項１に記載の水素貯蔵配合。
【請求項３】
前記電子供与金属Ｍ、前記多環式芳香族炭化水素ＰＡＨ及び前記溶媒Ｓｏｌｖ．が、
約$M_n(PAH)_m(Solv.)_q$
［式中、ｍ、ｎ及びｑは、約０．１＜ｎ＜約１５、約０．０７５＜ｍ＜約７．５、約１＜ｑ＜約５０である］のモル比で含まれる、請求項２に記載の水素貯蔵配合。
【請求項４】
前記多環式芳香族炭化水素が、下記式：
$C_{a(1-x)}A_{ax}H_b$，（Ｉ）
［式中、Ａは、Ｓｉ、Ｂ及び／又はＮであり、０＜ｘ＜１であり、ａ及びｂは、比ｂ／ａが０≦ｂ／ａ≦０．８の化学量論係数である］の多環式芳香族炭化水素である、請求項２又は３に記載の水素貯蔵配合。
【請求項５】
前記電子供与体が、１以上のアルカリ金属を含み、
前記多環式芳香族炭化水素が、ナフタレン、アントラセン及びピレンのうちの１以上を含み、
前記溶媒がテトラヒドロフランを含む、請求項１～４のいずれか１項に記載の水素貯蔵配合。
【請求項６】
前記アルカリ金属が、リチウム及び／又はカリウムを含む、請求項１～５のいずれか１項に記載の水素貯蔵配合。
【請求項７】
前記電子受容体が、１以上の有機ラジカルを含み、
前記化学種が、１以上の有機金属を含む、請求項１に記載の水素貯蔵配合。
【請求項８】
前記電子供与金属、前記１以上の有機ラジカル及び前記溶媒が、
$M_n(OR)_m$
［式中、ｍ及びｎは、約１＜ｎ＜６、約０．１＜ｍ＜約１０である］のモル比で含まれている、請求項７に記載の水素貯蔵配合。
【請求項９】
水素を更に含み、
前記水素が、前記化学種と反応し、それによって、前記溶媒に含まれる金属ヒドリド錯体を提供する、請求項１～８のいずれか１項に記載の水素貯蔵配合。
【請求項１０】
水素を、請求項１～９のいずれか１項に記載の水素貯蔵配合と接触させることを含み、
前記接触が、前記水素と、前記配合の前記溶媒中の前記化学種とが反応し、前記反応した水素を前記溶媒中に貯蔵することのできる条件下で一定時間行われる、水素を水素貯蔵配合中に貯蔵する方法。

【請求項１１】
前記水素貯蔵配合が、水素貯蔵配合圧力を有し、
前記水素が、水素圧を有し、
前記接触が、前記水素貯蔵配合圧力よりも実質的に高い水素圧で行われる、請求項１０に記載の方法。
【請求項１２】
前記水素圧が、約１～約２００ａｔｍの範囲に含まれる、請求項１１に記載の方法。
【請求項１３】
前記水素圧が、約５～約１００ａｔｍの範囲に含まれる、請求項１１に記載の方法。
【請求項１４】
前記水素圧が、約１０～約５０ａｔｍの範囲に含まれる、請求項１１に記載の方法。
【請求項１５】
前記接触が、単一工程で行われる、請求項１０～１４のいずれか１項に記載の方法。
【請求項１６】
前記接触が、２以上の工程で行われ、
各々の工程において、前記水素圧が水素工程圧であり、前記水素配合圧力が水素貯蔵配合工程圧力であり、
前記水素工程圧力及び水素貯蔵配合工程圧力が、実質的に維持されているか又は工程ごとに実質的に上昇する、請求項１０～１５のいずれか１項に記載の方法。
【請求項１７】
前記接触が、実質的に一定の温度で行われる、請求項１０～１６のいずれか１項に記載の方法。
【請求項１８】
請求項１０～１７のいずれか１項に記載の方法によって得ることのできる、水素貯蔵配合。
【請求項１９】
電子供与金属を含んだ電子供与体と、多環式芳香族炭化水素及び／又は有機ラジカルを含んだ電子受容体とを、溶媒中で接触させることを含み、
前記電子供与金属が、アルカリ金属、アルカリ土類金属、ランタニド金属、ホウ素族の金属、半金属及び／又はそれらの合金を含み、
前記接触が、前記電子供与金属を含んだ前記電子供与体の少なくとも一部を前記溶媒中に溶解させ、それによって、水素と反応し、前記溶媒中に水素を貯蔵することのできる化学種を発生させる、水素貯蔵配合を提供する方法。
【請求項２０】
前記化学種を水素と接触させ、前記溶媒内で金属ヒドリド錯体を形成することを更に含む、請求項１９に記載の方法。
【請求項２１】
アルカリ金属、アルカリ土類金属、ランタニド金属、ホウ素族の金属、半金属及び／又はそれらの合金を含む電子供与金属を含んだ電子供与体と、
多環式芳香族炭化水素及び／又は有機ラジカルを含んだ電子受容体と、
請求項１９又は２０に記載の方法において同時に組み合わせるか又は逐次的に使用するための溶媒と
を含んだ、水素貯蔵配合を提供するシステム。
【請求項２２】
請求項９又は１８に記載の水素貯蔵配合を、水素貯蔵配合圧力で提供することと、
前記水素貯蔵配合圧力を低下させて水素を放出することと
を含む、水素貯蔵配合から水素を放出する方法。
【請求項２３】
溶媒中に供給された、電子供与金属を含んだ電子供与体と、多環式芳香族炭化水素及び／又は有機ラジカルを含んだ電子供与体とを含み、

前記電子供与金属が、アルカリ金属、アルカリ土類金属、ランタニド金属、ホウ素族の金属、半金属及び／又はそれらの合金を含み、
前記電子供与金属及び前記電子受容体が、不安定なプロトンを含んだ化合物と反応して水素を生成することができる、水素貯蔵配合。
【請求項２４】
請求項２３に記載の水素発生配合と、不安定なプロトンを含んだ化合物とを接触させることを含み、
前記接触が、前記電子供与金属及び前記電子受容体と、水又は不安定なプロトンを含んだ有機分子とを反応させて水素を発生させる条件で、一定時間行われる、水素発生方法。
【請求項２５】
溶媒中に供給された、電子供与金属を含んだ電子供与体、及び、多環式芳香族炭化水素及び／又は有機ラジカルを含んだ電子受容体のうちの少なくとも２つと、
請求項２４に記載の方法において同時に組み合わせるか又は逐次的に使用するための、不安定なプロトンを含んだ１以上の有機分子と、
を含み、
前記電子供与金属が、アルカリ金属、アルカリ土類金属、ランタニド金属、ホウ素族の金属、半金属及び／又はそれらの合金を含む、水素発生システム。
【請求項２６】
水素を、前記水素が溶媒と反応することができる条件で、一定時間、前記溶媒に接触させることを含み、
前記溶媒が、電子供与金属を含んだ電子供与体の少なくとも一部を、電子受容体を更に含んだ溶液中に適当に溶解させることができ、
前記電子供与体が、アルカリ金属、アルカリ土類金属、ランタニド金属、ホウ素族の金属、半金属及び／又はそれらの合金を含む電子供与金属を含み、
前記電子受容体が、多環式芳香族炭化水素及び／又は有機ラジカルを含む、適当な溶媒に水素を貯蔵する方法。
【請求項２７】
請求項２６に記載の方法によって得ることのできる、水素を含んだ溶液。
【請求項２８】
請求項２７に記載の水素を含んだ溶液を始動圧力で提供することと、
前記始動圧力を低下させて水素を放出することと
を含んだ、水素を溶液から放出する方法。
【発明の詳細な説明】
【技術分野】
【０００１】
本願は、２００９年１２月１４日出願の米国仮出願第６１／２８６，１０４号の優先権を主張し、米国仮出願第６１／２８６，１０４号の全体を引用によって本明細書に組み入れる。
【０００２】
本開示は、水素の貯蔵及び／又は発生、並びに、関連する配合、組成物、方法及びシステムに関する。
【背景技術】
【０００３】
水素は、炭素質材料及び他の高多孔性又は金属合金材料等、固体状態の材料中に貯蔵され得る。
【０００４】
特には、水素を貯蔵するのに適当なほとんどの材料は、水素の貯蔵のために高圧及び低温を必要とする。その後、水素は、典型的には、熱又は化学反応によって貯蔵材料から発生し得る。
【発明の概要】

【課題を解決するための手段】
【０００５】
ここで提供されるのは、水素の貯蔵及び／又は放出のための配合、装置、組成物、方法及びシステムであり、これらは、種々の態様において、水素が貯蔵及び／又は放出され得る効率的な方法を提供する。
【０００６】
第１の側面によれば、水素貯蔵配合及び当該配合を含んだ装置が記載される。水素貯蔵配合は、溶媒中に供給された電子供与体及び電子受容体を含む。水素貯蔵配合において、電子供与体は、アルカリ金属、アルカリ土類金属、ランタニド金属、ホウ素族の金属、半金属及び／又はそれらの合金を含む電子供与金属を含み、電子受容体は、有機ラジカル及び／又は多環式芳香族炭化水素を含む。水素貯蔵配合において、電子供与金属を含んだ電子供与体の少なくとも一部は、溶媒に溶解し、それによって、水素と反応して溶媒中に水素を貯蔵することのできる化学種を発生する。いくつかの態様では、水素貯蔵配合は、当該配合中の化学種と反応して金属ヒドリド有機錯体を形成する水素を更に含む。水素貯蔵配合は、適当な水素貯蔵装置中に含まれていてもよい。
【０００７】
第２の側面によれば、水素貯蔵配合中に水素を貯蔵する方法と、それによって得ることのできる水素貯蔵配合とが記載される。当該方法は、水素を、本明細書に記載された溶媒中に供給された電子供与体及び電子受容体を含む水素貯蔵配合と接触させることを含み、ここにおいて、当該配合は、水素と反応することができる化学種を含んでいる。当該方法において、接触は、水素を当該配合中に貯蔵するための水素と当該化学種との反応を許容する条件で、一定時間行われる。
【０００８】
第３の側面によれば、水素貯蔵配合から水素を放出する方法が記載される。当該方法は、水素貯蔵配合圧力において、本明細書に記載された水素を含み、本明細書に記載された水素貯蔵配合を提供することと、水素貯蔵配合圧力を低下させて水素を放出することとを含む。
【０００９】
第４の側面によれば、適当な溶媒中に水素を貯蔵する方法と、それによって得ることのできる溶液が記載される。当該方法は、水素を、水素と溶媒との反応を許容する条件で、一定時間、溶媒に接触させることを含む。当該方法において、溶媒は、電子受容体を更に含んだ溶液中に、電子供与金属を含んだ電子供与体の少なくとも一部を溶解させることができ、電子供与体は、アルカリ金属、アルカリ土類金属、ランタニド金属、ホウ素族の金属、半金属及び／又はこれらの合金を含んだ電子供与金属を含み、電子受容体は、多環式芳香族炭化水素及び／又は有機ラジカルを含む。
【００１０】
第５の側面に従うと、溶液から水素を放出する方法が記載される。当該方法は、始動圧力で本明細書に記載された水素を含む溶液を提供することと、当該始動圧力を低下させて水素を放出することとを含む。
【００１１】
第６の態様によれば、水素発生配合及び水素発生器が記載される。水素発生配合は、本明細書に記載された溶媒中に供給された、本明細書に記載された電子供与体と電子受容体とを含む。水素発生配合において、電子供与金属と電子受容体とは、水又は不安定なプロトンを含んだ有機分子と反応して水素を発生させることができる。
【００１２】
第７の側面によれば、水素発生方法及びシステムが提供される。当該方法は、本明細書に記載された水素発生配合を、不安定なプロトンを含んだ化合物と接触させることを含み、当該接触は、水素を発生させるための、電子供与金属及び電子受容体と不安定なプロトンを含んだ化合物との反応を許容する条件で、一定時間行われる。当該システムは、本明細書に記載された溶媒中に供給された、本明細書に記載された電子供与体及び電子受容体

のうちの少なくとも２つと；本明細書に記載された方法において同時に組み合わせるか又は逐次的に使用するための、不安定なプロトンを含んだ１以上の化合物とを含む。

【００１３】

第８の側面によれば、水素貯蔵及び／又は発生配合を提供する方法及びシステムが記載される。当該方法は、本明細書に記載された溶媒中で、本発明に記載された電子供与体と電子受容体とを接触させることを含む。当該方法において、当該接触は、電子供与金属を含んだ電子供与体の少なくとも一部を溶媒に溶解させるように行われ、それによって、水素と反応して溶媒中に水素を貯蔵することができるか又は不安定なプロトンを含んだ化合物と反応して水素を発生させることのできる化学種を発生させる。いくつかの態様において、当該方法は、化学種を水素と接触させて、溶媒及び／又は配合内に金属ヒドリド錯体を形成することを更に含む。当該システムは、電子供与体及び電子受容体と、本明細書に記載された、当該方法において同時に組み合わせて又は逐次的に使用するための溶媒とを含み、本明細書に記載された水素貯蔵及び／又は水素発生システムを提供する。

【００１４】

本明細書で記載する、配合、組成物、装置、方法及びシステムは、水素貯蔵及び／又は発生が望まれる用途に関連して使用することができる。典型的な用途は、燃料、特に、燃料電池、電池、特には、携帯電話機への適用のための小型エネルギー担体、及び、水素オンデマンドシステムを含む、所謂、水素経済と関連した更なる用途を含み、これらは当業者によって識別可能である。更なる用途は、（例えば、塩素が関与する）化学反応の結果として水素が製造される産業プロセスを含み、当該プロセスでは、製造した水素を貯蔵する水素貯蔵が望まれる。

【００１５】

本開示の１以上の態様の詳細は、添付の図面及び以下の説明に示される。他の特徴、目的及び利点は、当該説明及び図面、並びに、特許請求の範囲から明らかである。

【００１６】

本明細書に組み込まれ、且つ、本明細書の一部を構成する添付図面は、本開示の１以上の態様を説明し、詳細な説明及び実施例と共に本開示の原理及び実施を説明する機能を果たす。

【図面の簡単な説明】

【００１７】

【図１】図１は、本明細書に記載された態様に従う、ＳＥＳ中に水素を貯蔵する典型的なシステムの略図を示す。水素は、タンク（１００）に貯蔵される。水素は、バルブ（１５０）を介してシステムに入ることができ、システムへ入る水素の圧力は、外気へのバルブ（１５５）と連結するバラトロン（１４０）によって測定される。最高で３００ｍｌまでの水素を格納スペース（１６０）に貯蔵することができる。圧力容器（１１０）は、ＳＥＳを収容している。バルブ（１７０）及び（１８０）は、水素が圧力容器に入るのを可能にする。バラトロン（１３０）は、圧力容器中の圧力変化を測定する。バルブ（１９０）は、回収装置（１２０）へのＳＥＳの回収を可能にする。

【図２】図２は、本明細書に記載された態様に従って行われる水素貯蔵を説明する略図を示す。特には、ＴＨＦ（２１０）中の水素、ＴＨＦ－ナフタレン－Ｋ（２２０）中の水素及びＴＨＦ－ナフタレン－Ｌｉ（２３０）中の水素に関して、圧力（ａｔｍ）に対する水素吸収（ｙ軸、重量％）について報告する。

【図３】図３は、本明細書に記載された態様に従う、水素選択透過膜を有する水素貯蔵及び発生反応器の略図を示す。

【図４】図４は、本明細書に記載された態様に従う、水素選択透過膜を有する水素発生反応器の略図を示す。

【発明を実施するための形態】

【００１８】

水素の貯蔵及び／又は放出のための配合、装置、組成物、方法並びにシステムが説明されるが、これらは、種々の態様において、溶媒中に供給された電子供与体と電子受容体、

及び／又は、単独の溶媒に基づいている。

【００１９】

「電子供与体」の語は、還元剤を指す。「還元剤（”reducing agent”及び”reduction agent”）」の語は、物質と反応し、当該物質に電子を与え、及び／又は、当該物質の酸化状態を減少させる物質を指す。電子供与体が電子を提供するクラスを、電子受容体と称する。

【００２０】

「電子受容体」の語は、酸化剤を指す。「酸化剤（"oxidation agent”及び”oxidizing agent”）」の語は、物質と反応し、当該物質に電子を失わせ、及び／又は、当該物質の酸化状態を増加させる物質を指す。電子受容体が電子を受容するクラスを、電子供与体と称する。

【００２１】

本明細書で使用する「溶媒」の語は、固体、液体又は気体溶質を溶解させて、溶液をもたらす液体、固体又は気体を指す。液体溶媒は、電子供与金属から電子受容体への電子移動を促進すべく、電子受容体（例えば、多環式芳香族炭化水素等）及び電子供与金属を溶解させることができる。溶媒は、本開示の可溶性水素貯蔵配合において、電子供与金属及び電子受容体を溶解させて電子供与金属イオン及び溶媒和電子を溶媒中に形成するために特に有用である。溶媒としては、有機分子を含んだ溶媒である「有機溶媒」が挙げられる。いくつかの態様において、溶媒は液体溶媒である。水素は、溶液中で、固体状態の結晶中よりも速く拡散することが予想される。いくつかの態様において、溶液が攪拌され、振とうされ、超音波処理され、又は、放射線照射されて水素ガスとの接触表面を増加させる場合、硬い構造の固体とは異なり、拡散が一層速い。

【００２２】

本明細書で説明する配合、組成物、装置、方法及びシステムにおいて、電子供与体は、電子供与金属を含む。「電子供与金属」の語は、１以上の電子を他へと移動させる金属を指す。本明細書に記載された電子供与金属としては、限定するものではないが、アルカリ金属、アルカリ土類金属、及びランタニド金属（ランタノイド金属としても既知）が挙げられる。本明細書で使用する「アルカリ金属」の語は、周期表の第１族（ＩＵＰＡＣ式）を形成する化学元素を指し、当該元素としては、リチウム（Ｌｉ）、ナトリウム（Ｎａ）、カリウム（Ｋ）、ルビジウム（Ｒｂ）、セシウム（Ｃｓ）及びフランシウム（Ｆｒ）が挙げられる。「アルカリ土類金属」の語は、周期表の第２族（ＩＵＰＡＣ式）を形成する化学元素：ベリリウム（Ｂｅ）、マグネシウム（Ｍｇ）、カルシウム（Ｃａ）、ストロンチウム（Ｓｒ）、バリウム（Ｂａ）及びラジウム（Ｒａ）を指す。本明細書で使用する「ランタニド金属」の語は、ランタンからルテチウムまでの、原子番号５７～７１を有する１５個の元素を指す。

【００２３】

本明細書に記載された電子供与金属としては、限定するものではないが、ホウ素（Ｂ）、アルミニウム（Ａｌ）、ガリウム（Ｇａ）、インジウム（Ｉｎ）を含むホウ素族（第１３族）の金属、ゲルマニウム、ケイ素及び炭素等の半金属（第１４族元素）、並びに、当業者によって識別可能な更なる半金属が挙げられる。

【００２４】

一態様において、電子供与体は、元素周期表の同じ又は異なる族からの１以上の電子供与金属を、当業者が識別することができる組み合わせで含んでいてもよい。特には、一態様において、電子供与金属は、１以上のアルカリ金属、アルカリ土類金属、ランタニド金属、ホウ素族の金属、半金属又は当業者が識別することができるそれらの混合物を含んでいてもよい。

【００２５】

本明細書に記載された配合、組成物、装置、方法及びシステムにおいて、電子受容体は、多環式芳香族炭化水素及び／又は有機ラジカルを含む。

【００２６】

「多環式芳香族炭化水素」（「ＰＡＨ」と略す）の語は、２以上の芳香環を含んだ炭化水素を指す。多環式芳香族炭化水素中の環は、六角形（６つの辺を有する環）、五角形（５つの辺を有する環）、四角形（４つの辺を有する環）及び三角形（３つの辺を有する環）の形状である。本願中の特定の多環式芳香族炭化水素における環の総数は、２～２００の範囲、特には、２～１００の範囲、特には、２～５０の範囲、特には、２～２０の範囲、及び、特には、２～１０の範囲である。本明細書に記載された多環式芳香族炭化水素は、電子受容体として機能し得る。

【００２７】

一態様において、多環式芳香族炭化水素（ＰＡＨ）は、１以上の複素環及びヘテロ原子置換を含み得る。１以上のＳｉ、Ｂ又はＮによる炭素原子の置換は、ＰＡＨの電子構造及びその電子受容体としての性質に影響を及ぼす。Ｓｉ－、Ｂ－及びＮ－を含んだＰＡＨ、並びに、特には多環式芳香族炭化水素置換されたＰＡＨは、増強された溶媒和電子形成能力を有し、ひいては、水素貯蔵を助ける。

【００２８】

いくつかの態様では、本明細書に記載されたＰＡＨは、一般式：

$$C_{a(1-x)}A_{ax}H_b, \quad (I)$$

［式中、Ａは、Ｓｉ、Ｂ及び／又はＮであり、０．００５＜ｘ＜０．９であり、ａ及びｂは、化学量論係数である］を有してもよい。ＰＡＨが式（Ｉ）の化合物である態様のうちのいくつかにおいて、ｘは、０．０１～０．７５、特には、０．０５～０．５０であり、更に特には、０．１～０．３であってよい。ＰＡＨが式（Ｉ）の化合物である態様のうちのいくつかにおいて、モル比Ｈ／Ｃ＝ｂ／ａは、０～０．８、特には、０．０５～０．７５、更に特には、０．１～０．５であってよい。

【００２９】

多環式芳香族炭化水素としては、限定するものではないが、グラフェン、フラーレン（例えば、Ｃ６０、Ｃ７０等）、アズレン、ナフタレン、１－メチルナフタレン、アセナフテン、アセナフチレン、アントラセン、フルオレン、フェナレン、フェナントレン、ベンゾ［ａ］アントラセン、ベンゾ［ａ］フェナントレン、クリセン、フルオランテン、ピレン、テトラセン、トリフェニレン、アンタントレン、ベンゾピレン、ベンゾ［ａ］ピレン、ベンゾ［ｅ］フルオランテン、ベンゾ［ｇｈｉ］ペリレン、ベンゾ［ｊ］フルオランテン、ベンゾ［ｋ］フルオランテン、コランニュレン、コロネン、ジコロニレン（Dicoronylene）、ヘリセン、ヘプタセン、ヘキサセン、オバレン、ペンタセン、ピセン、ペリレン及びテトラフェニレンが挙げられる。上記ＰＡＨの誘導体もまた、本発明の水素貯蔵及び発生に適用することができ、当該誘導体としては、式（Ｉ）中の水素を、限定するものではないが、アルキル基等の有機ラジカルによって、及び／又は、限定するものではないが、アルコール基、酸性基、ケトン基、アミン基等の有機官能基によって置換することにより得られるものが挙げられる。

【００３０】

「オルガノラジカル」又は「有機ラジカル」の語は、不対電子を有する有機分子を指す。有機ラジカルは、有機ラジカルのハライド類似体の形態で、溶液又は溶媒に提供され得る。有機ラジカルとしては、アルキルハライドとして溶液又は溶媒に供給され得るアルキルラジカルが挙げられる。有機ラジカルは、電荷移動、部分電子移動又は完全電子移動反応を介して電子供与金属と反応し、有機金属試薬を形成し得る。有機ラジカルは、電子受容体として機能し得る。「有機金属試薬」の語は、炭素原子と電子供与金属との間の１以上の直接的な結合を有する化合物を指す。有機ラジカルとしては、限定するものではないが、ブチル、エチル、メチル、フェニル及びアセチルラジカルが挙げられる。有機ラジカルは、当業者によって識別可能な、モノラジカル（例えば、ブチルリチウム等において）又は多重ラジカル（例えば、ジフェニル－リチウム及びエチル－メチル－リチウム等において）として存在し得る。

【００３１】

一態様において、電子受容体は、１以上のＰＡＨ、特には、式（Ｉ）のＰＡＨ、及び／

又は、１以上の有機ラジカルを、当業者が識別することができる組み合わせで含み得る。

【００３２】

本明細書に記載された配合、組成物、装置、方法及びシステムにおいて、電子供与金属を含んだ電子供与体の少なくとも一部は、溶媒中に溶解され、それによって、水素と反応して水素を溶媒中に貯蔵及び／又は発生させることのできる化学種を発生させる。特には、電子受容体が多環式芳香族炭化水素である態様において、化学種は、金属イオン及び溶媒和電子を含む。電子受容体が有機ラジカルである態様において、化学種は、有機金属を含む。

【００３３】

いくつかの態様において、本明細書に記載された配合、組成物、装置、方法及びシステムは、水素の貯蔵及び発生のための１以上の触媒を更に含み得る。本明細書で使用する「触媒」の語は、反応速度に適切に影響し、そして特には、反応速度を高める任意の化合物を指す。いくつかの態様において、本明細書に記載された配合、装置、組成物、方法及びシステムにおいて適当な触媒は、白金系触媒、鉄、マンガン、ニッケル及びコバルト系触媒、可溶及び不溶性遷移金属酸化物触媒（ＭＯｘ）、可溶及び不溶性遷移金属塩化物（ＣｏＣｌ２、ＦｅＣｌ３、ＮｉＣｌ２、ＭｎＣｌ２）、チタン、ジルコニウム、モリブデン、タングステン及びニオブ系触媒を含む。更なる触媒は、本開示に従って使用することができ、当業者が本開示を読むことにより識別することができる。

【００３４】

特には、電子受容体が、多環式芳香族炭化水素、特には、多環式芳香族炭化水素である態様において、本開示の配合及び組成物は、溶媒和電子の溶液の形態であってよい。「溶媒和電子」の語は、溶液中で溶媒和する電子を指す。溶媒和電子は、溶媒又は溶質分子には結合せず、むしろ、溶媒及び／又は溶質分子間の空間を占有する。溶媒和電子を含んだ溶液は、溶媒和電子の存在のため、より高い濃度において青色若しくは深緑色又は銅色であってよい。溶媒和電子の溶液を含んだ溶媒和電子溶液は、技術水準である、固体状態の水素貯蔵及び発生システムと比較して、水素貯蔵及び発生能力を著しく増加させ得る（重量％及び体積％で）。

【００３５】

「溶媒和電子溶液」又は「ＳＥＳ」の語は、水素貯蔵及び発生に関与する化学種が、少なくとも部分的に液体の形態で供給される溶液を指す。溶媒和電子溶液システムは、水素貯蔵及び発生に関与しない要素、例えば、支持電解質、溶解触媒、担持触媒、機械装置（例えば、機械的若しくは磁気攪拌子など）、音響若しくは超音波振動発生器、電磁波発生器並びに溶媒等を含んでいてもよい。「溶媒和電子溶液」は、いくつかの不溶性凝集体種を含んでいてもよい。典型的なＳＥＳは、［参考文献１］～［参考文献１１］に記載され、それらの各々は、引用によってその全体が本明細書に組み込まれる。

【００３６】

電子受容体が有機ラジカルである態様において、本開示の配合及び組成物は、有機金属溶液の形態であってよい。「有機金属溶液」の語は、アルキルラジカル等の有機種と、アルカリ金属、アルカリ土類金属、ホウ素族金属及び半金属等の強力な電子供与性金属と、溶媒とからなる化合物を指す。典型的な適当な化合物には、有機リチウム、有機シラン（例えば、ジシラン、シラノール、シラザン、シリケート、シロキサン、トリアルコキシシラン、当業者によって識別可能な他のもの）、有機アルミニウム、有機ゲルマニウム、及び、当業者によって識別可能な更なる化合物が含まれる。ヘキサン中のＮ－ブチルリチウムは、水素貯蔵及び発生のための「有機金属溶液」の一例である。本開示に示されるＮ－ブチルリチウム及び／又は更なる有機金属化合物のための他の適当な溶媒は、当業者によって識別することができる。「有機金属溶液」は、水素貯蔵及び発生に関与しない要素、例えば、支持電解質、溶解触媒、担持触媒、機械装置（例えば、機械的又は磁気攪拌子、音響又は超音波振動発生器、電磁波発生器等）及び溶媒を含んでいてもよい。「有機金属溶液」は、いくつかの不溶性凝集体種を含んでいてもよい。

【００３７】

「凝集体／凝集」及び「凝固／凝固物」の語は、同等に使用され、溶媒和電子溶液及び有機金属溶液が、固体沈殿物種を溶液中で形成する現象を表す。水素は、溶媒和電子溶液及び有機金属溶液が凝集又は凝固したときであっても、溶媒和電子溶液及び有機金属溶液に貯蔵され、且つ、当該溶液から発生する。

【００３８】

一態様において、本明細書に記載されたＳＥＳ及び有機金属溶液は、混合され、１以上のＳＥＳと１以上の有機金属溶液とを含んだ配合を形成し得る。

【００３９】

いくつかの態様において、本明細書に記載されたＳＥＳ及び有機金属溶液は、効果的な水素の貯蔵、放出及び発生が可能であり、それによって、水素貯蔵及び発生物質のクラスが、周囲温度及びより低圧においても、高い水素貯蔵及び発生能力を有することを可能にする。更に、一態様において、本明細書に記載されたＳＥＳ及び有機金属溶液は、従来の固体状態の水素貯蔵技術に対して、高い貯蔵及び発生能力と改良した安全性とを組み合わせた水素貯蔵及び発生システムを提供する。

【００４０】

いくつかの態様において、本明細書に記載されたＳＥＳ及び有機金属溶液は、非常に用途が広い。ＳＥＳ及び有機金属溶液は、周囲温度及び比較的低い水素圧で多量の水素を貯蔵及び発生させることができる。気液反応の場合、溶媒和電子溶液中での水素貯蔵及び発生の反応速度論は、機械的エネルギー、例えば、溶液攪拌、超音波振動、電磁場照射又は当該分野で既知の、気相と液相との間の接触面を増加させて溶液中の水素ガスの溶解及び移送を促進する他の全ての機械的及び照射手段等によって向上される。さらに、溶媒和電子溶液中に貯蔵される水素の量は、増加した水素圧及びより低い反応温度に伴って増加する。それに対して、溶媒和電子溶液から発生する水素の量は、より低い水素ガス圧及びより高い反応温度に伴って増加するであろう。

【００４１】

種々の態様において、本明細書に記載された水素貯蔵及び／又は発生配合は、電子供与体及び電子受容体を、電子供与金属を含んだ電子供与体の少なくとも一部を溶媒に溶解させ得る条件で、一定時間接触させ、それによって、水素と反応して、水素を溶媒中に貯蔵することのできる化学種を発生させることにより、提供され得る。

【００４２】

いくつかの態様において、溶媒、電子供与体及び電子受容体は、当業者が本開示を読むことにより識別することができる手順に従って、標準的な温度及び圧力、場合によっては、不活性雰囲気（例えば、グローブボックス）下で混合することができる。

【００４３】

配合がＳＥＳの形態である一態様において、金属：電子受容体：溶媒のモル比が、約１～６：０．０１～１０：１～１５である。配合がＭＯＲの形態である一態様において、金属：電子受容体：溶媒のモル比は、約１～６；０．１～１０：１～１５である。

【００４４】

本明細書に記載された配合、方法及びシステムにおいて適当なＳＥＳを提供する典型的な手順を、例１～３において説明する。

【００４５】

本明細書に記載された配合、方法及びシステムにおいて適当な有機金属溶液を提供する典型的な手順を、例４において説明する。

【００４６】

いくつかの態様において、本明細書に記載された配合は、水素を貯蔵する方法及び／又はシステムにおいて使用される。方法は、水素を、本明細書に記載された溶媒中に供給された電子供与体及び電子受容体を含んだ水素貯蔵配合と接触させることを含み、当該配合は、水素と反応することのできる化学種を含む。当該方法において、当該接触は、水素を化学種と反応させて水素を当該配合中に貯蔵し得る条件で、一定時間、行われる。本明細書で使用する「接触」又は「接触させる」の語は、直接的又は間接的に、少なくとも２つ

の部分が互いに物理的な結合を生ずることを指す。従って、接触には、当該部分を共に容器内に設置する等の物理的行為を含む。

【００４７】

配合がH_2中に存在する、本明細書に記載されたいくつかの態様において、H_2は、貯蔵中にＳＥＳ又は有機金属溶液（ＭＯＲ）に溶解することが予想され、これは、下記の組成に関する反応式に従って、脱貯蔵（de-storage）の間に放出される。

【化１】

$$M_n(PAH)_m(Solv.)_q + pH_2 \rightarrow M_n(PAH)_m(Solv.)_qH_{2p} \quad \text{<反応式1>貯蔵及び}$$

$$M_n(OR)_m + pH_2 \rightarrow M_n(OR)_mH_{2p} \quad \text{<反応式1'>貯蔵}$$

［式中、Ｍは、電子供与金属（例えば、Ｌｉ）、ＰＡＨ（例えば、ナフタレン）であり、ＯＲは、有機ラジカル（例えば、ブチル）であり、Ｓｏｌｖ．は、溶媒であり、特には、有機溶媒（例えば、テトラヒドロフラン）であり、$M_n(PAH)_m(Solv.)_qH_{2p}$及び$M_n(OR)_mH_{2p}$は、金属ヒドリド有機錯体であり、＜反応式１＞において、ｍ、ｎ及びｑは、約０．１＜ｎ＜約１５、約０．０７５＜ｍ＜約７．５、約１＜ｑ＜約５０、約０．０５ｎ＜ｐ＜１０ｎであり、＜反応式１’＞において、ｍ及びｎは、約１＜ｎ＜６、約０．１＜ｍ＜約１０、約０．０５ｎ＜ｐ＜１０ｎである］

【００４８】

本明細書で使用する「金属ヒドリド錯体」の語は、金属ヒドリドよりも弱いＭ－Ｈ結合を含む錯体を指す。本明細書で使用する「金属ヒドリド有機錯体」は、金属ヒドリド錯体を示し、これは、有機的部分（例えば、ＰＡＨ又はＯＲ）を更に含む。金属ヒドリド錯体を特徴付ける、ＭとＨとの間のより弱い結合に関する可能な説明は、限定することを意図するものではなく本明細書中に説明目的のためだけに含まれるが、Ｍ－Ｈ結合は、溶媒及び／又は溶媒中の溶媒和電子によって弱められるというものである。

【００４９】

従って、いくつかの態様において、ＳＥＳ又はＭＯＲに貯蔵される水素は、金属ヒドリドよりも容易に回収され、これは、通常は、必須ではなく、高温で加熱することを必要とする。いくつかの態様では、ＳＥＳ又はＭＯＲ中の水素は、従来の金属ヒドリドと比較して、周囲温度及び／又はより低温で回収され得る。

【００５０】

一態様において、Ｍは、１以上のアルカリ金属、アルカリ土類金属及び／又はランタニド金属であってよい。一態様において、Ｍは、１以上のアルミニウム、亜鉛、炭素、ケイ素、ゲルマニウム、ランタン、ユーロピウム、ストロンチウム又はこれらの金属の合金であってよい。いくつかの態様において、電子供与金属は、金属ヒドリド、金属アルミノヒドリド、金属ボロヒドリド、金属アルミノボロヒドリド又は金属ポリマーとして供給されてもよい。金属ヒドリドは、当該分野、例えば、本明細書の記載と矛盾しない程度で、引用によりその全体が本明細書に組み込まれる、A. Hajos,「錯体ヒドリド」, Elservier, Amsterdam,１９７９年において既知である。一態様において、Ｍは、Ｌｉ及び／又はＫであってもよい。

【００５１】

いくつかの態様では、溶媒中の電子供与金属イオンの濃度は、約０．１Ｍ以上であり、任意に、いくつかの用途については、０．２Ｍ以上、任意にいくつかの用途については約１Ｍである。特に、配合又は組成物がＳＥＳ溶液の形態であるいくつかの態様において、ＳＥＳ溶液中で過剰な金属を使用することもできる。それらの態様のうちのいくつかにおいて、過剰な金属は、一旦ＳＥＳが水素と組み合わされると、溶媒和電子のための「タンク（reservoir）」として機能し、故に、貯蔵される水素の量を増加させる。従って、い

くつかの態様において、金属Ｍは、固体状態の形態（例えば、大きな塊、ホイル及び粉末の形態）で、ＳＥＳに添加することができる。次いで、ＳＥＳは、金属及び溶媒和電子によって飽和され得る。水素が添加される場合、金属ヒドリド錯体が形成される。過剰に添加した金属は、ＳＥＳ中に溶解し、より多くの溶媒和電子を発生させ、従って、より多くの水素が、金属ヒドリド錯体の形態で貯蔵されるのを可能にする。それらの態様のうちのいくつかにおいて、添加したＭの量は、溶媒１リットル当たり０．１～５０モル、特には、１～５０モル、特には、５～５０モルの範囲である。

【００５２】

いくつかの態様では、溶媒中の電子供与金属イオンの濃度は、約０．１Ｍ～１０Ｍの範囲から選択され、任意にいくつかの用途については、約０．２Ｍ～約５Ｍの範囲から選択され、任意にいくつかの用途については、約０．２Ｍ～約２Ｍの範囲から選択される。

【００５３】

適当な多環式芳香族炭化水素（ＰＡＨ）の範囲には、１以上のアズレン、ナフタレン、１－メチルナフタレン、アセナフテン、アセナフチレン、アントラセン、フルオレン、フェナレン、フェナントレン、ベンゾ［ａ］アントラセン、ベンゾ［ａ］フェナントレン、クリセン、フルオランテン、ピレン、テトラセン、トリフェニレン、アンタントレン、ベンゾピレン、ベンゾ［ａ］ピレン、ベンゾ［ｅ］フルオランテン、ベンゾ［ｇｈｉ］ペリレン、ベンゾ［ｊ］フルオランテン、ベンゾ［ｋ］フルオランテン、コランニュレン、コロネン、ジコロニレン（Dicoronylene）、ヘリセン、ヘプタセン、ヘキサセン、オバレン、ペンタセン、ピセン、ペリレン及びテトラフェニレン並びにこれらのＰＡＨの混合物が含まれる。それらの態様のうちのいくつかにおいて、ＰＡＨは、式（Ｉ）の化学量論に従って置換される。

【００５４】

一態様において、有機金属溶液は、アルキルラジカルと、強力な電子供与金属、例えば、アルカリ金属（即ち、アルキル－アルカリ金属）、アルカリ土類金属（即ち、アルキル－アルカリ土類金属）、ホウ素及びアルミニウム等と、溶媒とを含む。ヘキサン中のＮ－ブチルリチウムは、水素貯蔵及び発生のための「有機金属溶液」の一例である。

【００５５】

「アルキル－アルカリ金属」の語は、アルキル有機ラジカルとアルカリ金属原子との組み合わせを指し、ここで、アルキルラジカルは、脂肪族炭化水素から得られる、一般式C_zH_{2z+1}［但し、ｚ≧１］の一連の分岐した又は分岐していない１価の基を示す。典型的なアルキル－アルカリ金属は、メチルリチウム、メチルナトリウム、メチルカリウム、メチルルビジウム、メチルセシウム、メチルフランシウム、エチルリチウム、エチルナトリウム、エチルカリウム、エチルルビジウム、エチルセシウム、エチルフランシウム、プロピルリチウム、プロピルナトリウム、プロピルカリウム、プロピルルビジウム、プロピルセシウム、プロピルフランシウム、ブチルリチウム、ブチルナトリウム、ブチルカリウム、ブチルルビジウム、ブチルセシウム、ブチルフランシウム、ペンチルリチウム、ペンチルナトリウム、ペンチルカリウム、ペンチルルビジウム、ペンチルセシウム、ペンチルフランシウム、ヘキシルリチウム、ヘキシルナトリウム、ヘキシルカリウム、ヘキシルルビジウム、ヘキシルセシウム、ヘキシルフランシウム、ヘプチルリチウム、ヘプチルナトリウム、ヘプチルカリウム、ヘプチルルビジウム、ヘプチルセシウム、ヘプチルフランシウム、オクチルリチウム、オクチルナトリウム、オクチルカリウム、オクチルルビジウム、オクチルセシウム、オクチルフランシウム、ノニルリチウム、ノニルナトリウム、ノニルカリウム、ノニルルビジウム、ノニルセシウム、ノニルフランシウム、デシルリチウム、デシルナトリウム、デシルカリウム、デシルルビジウム、デシルセシウム、デシルフランシウム、ウンデシルリチウム、ウンデシルナトリウム、ウンデシルカリウム、ウンデシルルビジウム、ウンデシルセシウム、ウンデシルフランシウム、ドデシルリチウム、ドデシルナトリウム、ドデシルカリウム、ドデシルルビジウム、ドデシルセシウム及びドデシルフランシウムを含む。

【００５６】

いくつかの態様において、溶媒中の電子受容体の濃度は、約０．１Ｍ以上、任意にいくつかの用途については、０．２Ｍ以上、任意にいくつかの用途については、１Ｍ以上である。いくつかの態様では、溶媒中の電子受容体の濃度は、０．１Ｍ～１５Ｍの範囲から選択され、任意にいくつかの用途については、０．２Ｍ～５Ｍの範囲から選択され、任意にいくつかの用途については、０．２Ｍ～２Ｍの範囲から選択される。

【００５７】

様々な溶媒が、本明細書中に記載されたＳＥＳ並びに水素貯蔵及び発生システムとともに使用され得る。いくつかの用途には、顕著な量の（例えば、約０．１～１５Ｍの溶液を生成する）電子供与金属及び電子受容体を溶解することができる溶媒が好ましい。

【００５８】

例えば、いくつかの態様では、溶媒は、水、テトラヒドロフラン（ＴＨＦ）、ヘキサン、ペンタン、ヘプタン、エチレンカルボネート、プロピレンカルボネート、ベンゼン、二硫化炭素、四塩化炭素、ジエチルエーテル、エタノール、クロロホルム、エーテル、ジメチルエーテル、ベンゼン、プロパノール、酢酸、アルコール、イソブチルアセテート、ｎ－ブチル酸、酢酸エチル、Ｎ－メチルピロリドン、Ｎ，Ｎ－ジメチルホルメート、エチルアミン、イソプロピルアミン、ヘキサメチルホスホトリアミド、ジメチルスルホキシド、テトラアルキル尿素、トリフェニルホスフィンオキシド又はこれらの混合物である。いくつかの態様において、混合物のうちの１つの溶媒が電子受容体を溶媒和させることができ、混合物のうちの別の溶媒が支持電解質を溶媒和させることができるような溶媒の混合物が望ましい。一態様において、溶媒は、ＴＨＦ、ベンゼン及び／又はナフタレン或いはこれらの混合物であってよい。一態様において、ナフタレン、アントラセン及びピレン又はこれらの混合物である。電子供与金属がアルカリ金属を含む一態様では、溶媒は、ＴＨＦ、ナフタレン及びテトラセンであってよく、これらを使用して、アルカリ金属又はそれらの混合物を溶解させることができる。

【００５９】

いくつかの態様において、ＳＥＳ及びＭＯＲ溶液に適当な溶媒は、テトラヒドロフラン（ＴＨＦ）、フラン、ピロリドン、ジオキサン、ジエチルエーテル、ピロール、ピロリン、ピロリジン、チオフェン、チオエーテル、テトラヒドロチオフェン、ジエチルスルフィド、ベンゾチオフェン、ジベンゾチオフェン、ジメチルホルムアミド（ＤＭＦ）、ジメチルスルホキシド、アセトニトリル、ｎ－メチルホルムアミド、アセタミド、ホルムアミド、ヘキサメチルホスホルアミド（ＨＭＰＡ）、ヘキサメチルリン酸トリアミド（ＨＭＰＴ）、ｎ－メチルピロリドン（ＮＭＰ）、イソブチルアセテート、エチルアセテート、ベンゼン、ヘキサン、四塩化炭素、ジオキシメタン、シクロヘキサン、ペンタン、ヘプタン、トルエン及びアセトンを含む。

【００６０】

いくつかの態様において、適当な溶媒は、１以上の無機溶媒を含む。典型的な適当な無機溶媒は、テトラボロヒドリドBH_4、テトラアルミノヒドリドAlH_4、シリカ－アルミノヒドリド（例えば、$Si_yAl_{1-y}H_4$、ボロ－シリカヒドリド$Si_yB_{1-y}H_4$及び／又はボロ－アルミノヒドリド$B_yAl_{1-y}H_4$、式中、$0<y<1$である）を含む。適当な更なる無機溶媒は、当業者が本開示を読むことにより識別することができる。

【００６１】

一態様において、$M_n(PAH)_m$及び特にＰＡＨは、多量ではあるが、溶液が凝固しないような量で溶媒中に溶解する。例えば、凝固が望まれない態様において、金属：ＰＡＨ：溶媒の最適モル濃度は、Ｌｉ／ナフタレン／ＴＨＦを含んだ典型的なＳＥＳについて、約１～６：１～３：２～１２．３３、好ましくは、約１～４：１～２：４～１２．３３、より好ましくは、約１～２：１～２：６～１２．３３と決定された。当業者は、金属及びＰＡＨをＳＥＳに溶解させる任意の濃度が水素の貯蔵を可能にすることを理解するであろう。

【００６２】

一態様において、溶媒中に溶解した$M_n(OR)_m$の量は、多量であるが、溶液が凝固しないような量である。例えば、凝固が望まれない態様において、金属：ＯＲ：溶媒の最適モル濃度は、Ｌｉ／ブチル／ヘキサンを含んだ典型的なＭＯＲについて、約１～３：１～３：２～８、好ましくは、約１～２：１～2:４～８、より好ましくは、約１～２：１～２：６～８と決定された。当業者は、金属及び有機ラジカルをＭＯＲに溶解させる任意の濃度が、水素貯蔵を可能にすることを理解するであろう。

【００６３】

いくつかの態様において、ＭＯＲのための典型的な溶媒は、ジブチルエーテル、ジオキシメタン、ジエチルエーテル、ベンゼン、シクロヘキサン、ペンタン、ＴＨＦ、ヘプタン、ヘキサン及びトルエンである。

【００６４】

配合において水素の貯蔵を可能にする条件下、一定時間、水素を当該配合に接触させる一態様においては、水素が、単一工程によって当該配合に直接的に導入され、且つ、貯蔵され得る。時間、温度及び圧力は、使用される特定の配合によって決まり、当業者が本開示を読むことにより識別することができる。

【００６５】

それらの態様のうちのいくつかにおいて、水素導入が、適度な圧力、例えば約１０ａｔｍで行われ得るが、水素は、それよりも低いか又は高い圧力で貯蔵されてもよい。いくつかの態様において水素圧は、約１～２００ａｔｍの範囲である。それらの態様のうちいくつかにおいて、水素圧は、約５～１００ａｔｍの範囲である。それらの態様のうちいくつかにおいて、水素圧は、約１０～５０ａｔｍの範囲である。

【００６６】

いくつかの態様において、水素貯蔵は、室温で行われ得るが、水素貯蔵は、それよりも低温又は高温で行われてもよい。特には、いくつかの態様において、水素貯蔵は、実質的に溶媒の融点と沸点との間に含まれる温度で行われ得る。例えば、溶媒がＴＨＦ（限定するものではないが、一般的にはＳＥＳに関して）である一態様では、水素貯蔵は、約－１０８．４℃～約＋６６℃の温度で行われ得る。溶媒がエキサン（ｅｘａｎｅ）（限定するものではないが、一般的にはＭＯＲに関して）である一態様では、水素貯蔵は、約－９５℃～約＋６９℃の温度で行われ得る。適当な更なる温度は、当業者が識別することができ、例えば、種々の溶媒若しくはそれらの混合物の融点と沸点との間に含まれる温度、又は、当業者が特定できる他の適当な温度である。

【００６７】

一態様において、水素を導入する方法では、接触は、単一工程で行われ得る。それらの実施形態のいくつかにおいて、圧力及び／又は温度は、接触の間、実質的に一定に維持される。

【００６８】

一態様において、水素は、多段階プロセスで導入され得る。それらの態様のうちのいくつかにおいて、水素を第１圧力で接触し、そして、水素が通常は第１圧力よりも実質的に低い第２圧力において貯蔵されるように、接触は、水素圧を安定化させる条件で一定時間行われる。次いで、更なる量の水素を、典型的には、第２圧力以上の第３圧力で添加し、接触は、通常は実質的に第３圧力以下の第４圧力で水素圧を安定化させる条件で、一定時間行われる。当該プロセスは、何回か繰り返され、その回数は、当業者に理解される通り、望まれる水素貯蔵及び使用される特定の配合によって決定され得る。

【００６９】

パラメータの性質に関して本明細書で使用する「実質的に」の語は、パラメータの値を示し、これは、特定された性質に著しい影響を与えない特定された範囲の値の変化であるパラメータ値を示す。当業者は、示される特定のパラメータ及び性質に基づき、これらの変化を識別することができる。

【００７０】

いくつかの態様において、ＳＥＳ中の水素貯蔵が金属なしに生ずる配合、方法及びシス

テムが記載される（例５）。いくつかの態様において、ＳＥＳ中の水素貯蔵が金属としてカリウムを使用して行われる配合、方法及びシステムが提供される（例６）。いくつかの態様において、ＳＥＳ中の水素貯蔵が金属としてリチウムを使用して行われる配合、方法及びシステムが提供される（例７）。

【００７１】

いくつかの態様において、水素は、本明細書に記載された水素を典型的には金属ヒドリド錯体内に含んだ水素貯蔵配合を提供し、水素貯蔵配合は配合圧力で提供され、そして、水素を放出するように配合圧力を減少させることにより、水素貯蔵配合から放出することができる。

【００７２】

ＳＥＳ及び／又はＭＯＲの形態の配合において、当該配合は典型的には、本明細書に記載された金属ヒドリド有機錯体内に水素を含む。それらの形態のうちのいくつかにおいて、金属ヒドリド有機錯体からの水素の放出を対象とする、組成に関する逆反応式は、反応式１及び１’の双方において、H_2の脱貯蔵の間に起こることが予測される。

【００７３】

配合圧力が、例えば、初期の配合圧力から初期圧力よりも実質的に低い最終配合圧力へと減少し、配合からの水素放出に関連する一態様において、水素は、一段階プロセスで放出される。初期配合圧力が、複数の中間配合圧力を介して初期配合圧力よりも実質的に低い最終配合圧力まで減少する態様において、水素は、多段階プロセスで放出され得る。特には、これらの態様のうちのいくつかにおいて、初期配合圧力は、まず、初期配合圧力よりも実質的に低い第１中間配合圧力まで減少する。次いで、第１中間配合圧力は、第１中間配合圧力よりも実質的に低い第２中間配合圧力まで減少する。次いで、第２中間配合圧力は、更なる数の中間配合圧力を介して、最終配合圧力まで低下し、更なる数の中間配合圧力は、特定の配合及び望まれる水素放出に基づき当業者によって識別され得る。

【００７４】

ＳＥＳ又はＭＯＲ中の金属ヒドリド有機錯体から水素を放出する典型的な手順は、例において説明される（例８、９及び１１を参照のこと）。貯蔵された水素を含んだ配合から水素を放出するのに適当な更なる手順は、攪拌、及び、当業者が本開示を読むことにより識別することのできる追加の方法を含む。

【００７５】

各々の工程において温度が実質的に一定に維持され、圧力が定速で減少する一態様において、水素の放出は、室温及び一段階又は多段階の手順に従う圧力で行われ得る。更なる温度及び圧力、並びに、温度変化及び圧力変化は、特定の配合及び望まれる放出を考慮して、当業者が識別することができる。特に、いくつかの態様では、温度と圧力との適当な組み合わせが選択され、溶媒の蒸発を最小化する。

【００７６】

いくつかの態様において、水素放出に適当な温度は、溶媒の融点と沸点との範囲内である。溶媒が、融点及び沸点がそれぞれ－１０８．４℃（融点）又は６６℃（沸点）のＴＨＦである態様において、適当な温度は、－１０８．４℃よりも低く、６６℃よりも高いと予測される。例えば、ＴＨＦ系のＳＥＳでは、適当な温度範囲は、約－５０℃～約＋５０℃、特には、約－３０℃～約＋４０℃であると予測される。異なる溶媒を含んだ配合に関する更に適当な温度は、当業者が識別可能である。溶媒が、融点及び沸点がそれぞれ－９５℃（融点）又は６９℃（沸点）のヘキサンである態様において、適当な温度は、－９５℃未満であり、６９℃を超えると考えられている。例えば、ヘキサン系ＭＯＲにおいて、適当な温度範囲は、約－５０℃～約＋５０℃であり、特には約－２０℃～約＋５０℃であると考えられている。異なる溶媒を含んだ配合に更に適当な温度は、当業者が識別することができる。

【００７７】

ＳＥＳ又はＭＯＲ中の水素貯蔵及び放出のための典型的な手順は、例８、９及び１１で記載する。

【００７８】
水素が放出されるいくつかの態様では、蒸発した溶媒からの水素の分離は、放出によって又はその後に、当該配合で使用される他の分子及び特には特定の溶媒若しくはそれらの混合物を更に含んだ混合物から水素を選択するのに適した適当なフィルターを使用して行われ得る。いくつかの典型的な態様において、水素を選択的に透過させるセラミック膜を使用して、水素と溶媒分子とを物理的に分離させることができる（例８及び９を参照）。
【００７９】
いくつかの態様において、水素は、本明細書に記載された適当な溶媒中に貯蔵され、且つ、放出され得る。それらの態様において、水素貯蔵は、水素と溶媒とを反応させ得る条件で、一定時間、水素を溶媒に接触させることによって行われ得る。本明細書に記載された溶媒のいずれかを使用して、本明細書に記載された方法に従って、水素を貯蔵することができる。電子供与体及び電子供与体の非存在下、水素が溶媒中に貯蔵される典型的な態様は、例５に記載される。それらの態様のうちのいくつかにおいて、水素は、本明細書に記載された水素の貯蔵方法によって得ることのできる溶液から放出され得る。特には、いくつかの態様において、それらの溶媒からの放出は、本明細書に記載された水素を含んだ溶液を始動圧力で提供し、当該始動圧力を低下させて水素を放出することによって行われ得る。
【００８０】
いくつかの態様において、水素を発生させるのに適当な配合、方法及びシステムが提供され得る。水素発生配合は、本明細書に記載された溶媒中に、本明細書に記載された電子供与体及び電子受容体を含む。水素発生配合において、電子供与金属と電子受容体とは、水又は他の分子、特に、不安定なプロトンを含んだ有機分子と反応し、水素を発生させることができる。
【００８１】
一態様において、ＳＥＳ又はＭＯＲを使用して、本明細書に記載された方法及びシステムにおいて水素を発生させることができる。当該方法は、水又は不安定なプロトンを含んだ有機分子を、アルカリ金属及び／又はアルカリ土類金属を有機芳香族溶媒中に含んだ溶媒和電子溶液に接触させることを含み、当該接触は、水素金属ヒドロキシド及び金属オキシドを発生させる条件で、一定時間行われる。
【００８２】
いくつかの態様において、水素貯蔵及び発生又はH_2O、アルコール若しくは不安定なプロトンを含んだ他の分子からの放出が行われる方法が提供される。いずれかの理論に限定されることなく、特にはいくつかの態様において、水素は、下記の組成に関する反応式：
【化２】

$$M_n(PAH)_m(Solv.)_q + n(s+t)H_2O \rightarrow nMO_s(OH)_t + nsH_2 + mPAH + qSolv. \quad \text{<反応式2>}$$

$$M_n(OR)_m + n(s+t)H_2O \rightarrow nMO_s(OH)_t + nsH_2 + m/2(OR)_2 \quad \text{<反応式2'>及び}$$

$$M_n(PAH)_m(Solv.)_q + nR\text{-}OH \rightarrow nR\text{-}O\text{-}Li + n/2H_2 + mPAH + qSolv. \quad \text{<反応式3>}$$

$$M_n(OR)_m + nR'\text{-}OH \rightarrow nR'\text{-}O\text{-}Li + n/2H_2 + m/2(OR)_2 \quad \text{<反応式3'>}$$

［式中、Ｍ、ＰＡＨ、Ｓｏｌ、ＯＲ、ｎ、ｍ及びｑは、反応式＜反応式１＞及び＜反応式１’＞について上述した値のいずれかであってよく、＜反応式２＞及び＜反応式３＞において、ｍ、ｎ、及びｑは、約０．１＜ｎ＜約１５、約０．０７５＜ｍ＜約７．５、約１＜ｑ＜約５０、約０．０５ｎ＜ｐ＜１０ｎ、０≦ｓ≦約２、０≦ｔ≦４であり、＜反応式２

’＞及び＜反応式３’＞において、ｍ及びｎは、約１＜ｎ＜６、約０．１＜ｍ＜約１０及び約０．０５ｎ＜ｐ＜１０ｎ、０≦ｓ≦約２、０≦ｔ≦４である］に従って、例えば水及びアルコールとの反応によってＳＥＳ及びＭＯＲ溶液から放出されると考えられる。

【００８３】

反応式＜反応式２＞及び＜反応式２’＞において、$MO_s(OH)_t$は、金属の酸化生成物を示し、いくつかの態様において、酸化生成物は、酸化物、水酸化物若しくは酸化水酸化物又はこれらの混合物であってよい。

【００８４】

いくつかの態様では、水素発生又はH_2O、アルコール若しくは不安定なプロトンを含んだ他の有機分子からの放出が、ＳＥＳ形態の配合又は組成物を使用して行われる方法が提供される。これらの態様のうちのいくつかでは、いずれの理論にも限定されることなく、水素発生は、典型的なＨ２Ｏ及びアルコールに関して本明細書に示された組成に関する反応式に従い得る。

【化３】

$$M_n(PAH)_m(Solv.)_q + n(s+t)H_2O \rightarrow nMO_s(OH)_k + mPAH + qSolv. + n(s+t/2)H_2 \quad \text{〈反応式4〉}$$

$$M_n(PAH)_m(Solv.)_q + nROH \rightarrow nROM + mPAH + qSolv. + n/2\,H_2 \quad \text{〈反応式4’〉}$$

［＜反応式４＞及び＜反応式４’＞において、ｍ、ｎ及びｑは、約０．１＜ｎ＜約１５、約０．０７５＜ｍ＜約７．５、約１＜ｑ＜約５０、約０．０５ｎ＜ｐ＜１０ｎ、０≦ｓ≦約２、０≦ｔ≦４であり、$MO_s(OH)_k$は、金属酸化物生成物の一般表記であり、いくつかの態様において、酸化物（ｋ＝０）、水酸化物（ｓ＝０）、金属酸化物－水酸化物（ｋ＞０及びｓ＞０）又はそれらの組み合わせであってよい］

【００８５】

本明細書に記載された配合及び組成がＭＯＲの形態である態様において、いずれの理論にも限定されないが、水素発生は、下記の組成に関する反応式：

【化４】

$$M_n(OR)_m + n(s+t)H_2O \rightarrow nMO_s(OH)_k + n(s+t/2)H_2 + m/2(OR)_2 \quad \text{〈反応式5〉}$$

$$M_n(OR)_m + nR'OH \rightarrow nR'OM + n/2\,H_2 + m/2(OR)_2 \quad \text{〈反応式5’〉}$$

［＜反応式５＞及び＜反応式５’＞において、ｍ及びｎは、約１＜ｎ＜６、約０．１＜ｍ＜約１０、約０．０５ｎ＜ｐ＜１０ｎ、０≦ｓ≦約２、０≦ｔ≦４であり、当該接触は、ＴＨＦ又は本明細書に記載された適当な他の溶媒中で行われる］に従って行われ得る。

【００８６】

いくつかの態様において、不安定なプロトンを有する他の化合物を、適所に、又は水若しくはアルコール単独に加えて、或いは、適当な混合物中で使用することができる。不安定な水素（プロトン）を含んだ有機化合物又は官能基の非包括的なリストには、アルコール、アルデヒド、カルボン酸、ヒドロペルオキシド、アミド、アミン、イミン、スルホン酸、チオール、ホスフィン、ホスホン酸及びホスフェートが含まれる。ＳＥＳ又はＭＯＲに接触させて投入される場合、典型的には、これらの官能基の１つ又は組み合わせを有する有機及び無機化合物の全てが、水素生成のための良好な反応物質である。不安定な水素（プロトン）を含んだ無機反応物質液体の非包括的なリストには、水、過酸化水素（H_2O_2）、水中の無機酸溶液、水中の無機塩基溶液が含まれる。当業者は、更なる適切な有機化合物及び無機化合物を識別することができる。

【００８７】
いくつかの態様において、水素を発生させる接触は、本明細書に記載された配合及び組成物に関連して使用される、ＳＥＳ／ＭＯＲと、不安定なプロトンを含んだ有機及び無機反応物質の組み合わせとの間で行われる。一態様において、接触は、例えば、Ｇａを被覆したＡｌ金属に水を添加することにより行われてもよい。$NaBH_4$に添加した水は、更に、水素化ホウ素中の結合した水素を放出させる。
【００８８】
金属酸化物及び／又は金属水酸化物及び／又は金属酸化物－水酸化物化合物は、水又はアルコールのＳＥＳ及び／又はＭＯＲとの反応の結果、形成され、水素を発生し得る。
【００８９】
水素の貯蔵及びH_2O、アルコール又は他の有機分子からの発生に関する典型的な記載は、（例１０）及び（例１１）に記載される。
【００９０】
いくつかの態様において、装置の２つの別々の区画（例えば、タンク又は他の適当な容器）において、ＳＥＳ／ＭＯＳを一方に、不安定なプロトンを有する１以上の化合物を他方に保存し、制御された環境及び制御された流量で混合し、水素を発生させることができる。ＳＥＳ／ＭＯＲと、不安定なプロトンを含んだ化合物との間の接触は、当業者が識別することのできる異なる方法で達成され得る。
【００９１】
例えば、いくつかの態様において、H_2O又は不安定なプロトンを含んだ他の化合物が、ＳＥＳ／ＭＯＲの容器に制御された速度で導入され得る（例１０を参照）。それらの態様のうちいくつかにおいて、水素は、反応式４及び４’並びに５及び５’に従って直ちに発生させることができる。特に、H_2発生速度は、不安定プロトンを含んだ化合物（例えば、水又はアルコール）の導入速度に、通常比例する。それらの態様のうちのいくつかにおいて、反応は、典型的には熱を発する。
【００９２】
更に典型的な態様において、ＳＥＳ／ＭＯＲ及び不安定プロトンを有する化合物は、第３の容器に一緒に導入され、第３の容器内でH_2が生成する。H_2生成速度は、典型的には、ＳＥＳ／ＭＯＲ及び不安定なプロトンを含んだ化合物の導入速度に比例し、その組成比は、反応式４、４’、５及び５’に従って決定され得る。
【００９３】
更なる典型的な態様において、ＳＥＳ／ＭＯＲ及び不安定なプロトンを含んだ化合物は、容器の圧力よりも高い圧力で同じ容器に一緒に噴霧される。いくつかの態様において、当該方法は、内燃車両エンジンにおけるガス及び空気注入と同様にして行われる。それらの態様において、噴霧における擬似蒸気中の反応物質間の効率的な接触には、高圧が、典型的に有利に働く。
【００９４】
水素が放出されるいくつかの態様において、蒸発した溶媒からの水素の分離は、放出によって又はその後に、当該配合で使用する他の分子、特には特定の溶媒若しくはその混合物を更に含んだ混合物から水素を選択するのに適した適当なフィルターを使用して行われ得る。いくつかの典型的な態様において、水素を選択的に透過させるセラミック膜を使用して、水素と溶媒分子とを物理的に分離させることができる。
【００９５】
水素が発生するいくつかの態様において、蒸発した溶媒からの水素の分離は、放出によって又はその後に、当該配合で使用される他の分子、特には特定の溶媒若しくはその混合物を更に含んだ混合物から水素を選択するのに適した適当なフィルターを使用して行われ得る。いくつかの典型的な態様において、水素を選択的に透過させるセラミック膜を使用して、水素と溶媒分子とを物理的に分離させることができる（例１０及び１１を参照のこと）。
【００９６】

一態様において、水素を貯蔵又は発生させる配合は、アルカリ金属、アルカリ土類金属、ランタニド金属又はそれらの合金である電子供与金属を含んだ電子供与体と；溶媒中に供給された、多環式芳香族炭化水素又は有機ラジカルである電子受容体と；を含み、電子供与金属を含んだ電子供与体の少なくとも一部は、溶媒に溶解し、それによって、溶媒中に電子供与金属イオン及び溶媒和電子を、又は、溶媒中に有機金属を、それぞれ発生させてもよい。

【００９７】

一態様において、水素を貯蔵又は発生させる配合は、溶媒中に供給された、リチウムである電子供与金属を含んだ電子供与体と；溶媒中に供給された、多環式芳香族炭化水素である電子受容体と；を含み、電子供与金属を含んだ電子供与体の少なくとも一部は、溶媒に溶解し、それによって、金属イオン及び溶媒和電子を溶媒中に発生させてもよい。

【００９８】

一態様において、水素を貯蔵又は発生させる配合は、溶媒中に供給された、ナトリウムである電子供与金属を含んだ電子供与体と；溶媒中に供給された、多環式芳香族炭化水素である電子受容体と；を含み、それによって、ナトリウムイオン及び溶媒和電子を溶媒中に発生させてもよい。

【００９９】

一態様において、水素を貯蔵又は発生させる配合は、溶媒中に供給された、カリウムである電子供与金属を含んだ電子供与体と；溶媒中に供給された、多環式芳香族炭化水素である電子受容体と；を含み、それによって、カリウムイオン及び溶媒和電子を溶媒中に発生させてもよい。

【０１００】

一態様において、水素を貯蔵又は発生させる配合は、溶媒中に供給された、アルカリ金属、アルカリ土類金属、ランタニド金属又はそれらの合金である電子供与金属と；溶媒中に供給された、多環式芳香族炭化水素又は有機ラジカルである電子受容体と；少なくとも部分的に溶媒に溶解した金属を含んだ支持電解質と；を含み、それによって、電子供与金属イオン及び溶媒和電子を溶媒中に発生させてもよい。

【０１０１】

いくつかの態様において、本明細書に記載されたＳＥＳ及びＭＯＲ並びにそれらの混合物は、時間とともに凝集し、溶液内に固体状態の相を形成する傾向がある。かかる凝集は、本開示に従う溶媒和電子溶液及び有機金属溶液の水素貯蔵及び発生能力に影響を及ぼさない。凝集体は、多量の液体溶媒を含んでいるので、高濃縮の溶媒和電子溶液及び有機金属溶液である。高濃度の溶媒和電子溶液及び有機金属溶液並びに凝集体は、当該溶液及び当該凝集体中に貯蔵及び発生した水素の重量及び体積割合を増加させるために望ましい。

【０１０２】

いくつかの態様において、溶媒和電子溶液が、水素貯蔵及び発生システムにおいて使用され、当該溶媒和電子溶液は、溶媒中に供給された、アルカリ金属、アルカリ土類金属、ランタニド金属又はそれらの合金である電子供与金属を含んだ電子供与体と；溶媒中に供給された、多環式芳香族炭化水素又は有機ラジカルである電子受容体と；を含み、電子供与金属を含んだ電子供与体の少なくとも一部は、溶媒に溶解し、それによって、電子供与金属イオン及び溶媒和電子を溶媒中に発生させる。一態様において、溶媒和電子溶液は、電子供与金属の供給源を更に含み、電子受容体又は溶媒は、操作上、溶媒和電子溶液に結合している。

【０１０３】

いくつかの態様において、本明細書に記載された水素の配合、組成物、方法及びシステムは、電子受容体として有機ラジカルを含み、ヘキサン中のブチルリチウム（ＢｕＬｉ）溶液、ヘキサン中のブチルナトリウム（ＢｕＮａ）、ヘキサン中のジブチルマグネシウム及びヘキサン中のジエチルマグネシウム等のアルカリ金属及びアルカリ土類金属を含んだ有機金属溶液の形態である。

【０１０４】

いくつかの態様において、本明細書に記載された、水素貯蔵及び発生のための配合及び組成物中の有機ラジカルは、電荷移動、部分電子移動又は完全電子移動反応を介して、電子供与金属と反応し、有機金属試薬を形成する。有用な有機ラジカルとしては、例えば、アルキルラジカル（例えば、ブチルラジカル、フェニルラジカル、ビフェニルラジカル又はアセチルラジカル等）、アリルラジカル、アミノラジカル、イミドラジカル及びホスフィノラジカルが挙げられる。

【０１０５】

本明細書に開示される通り、本明細書に記載された電子供与体と電子受容体と溶媒とは、水素を貯蔵、放出及び／又は発生させる、本明細書に記載された方法のいずれかを含んだシステムの一部として提供することができる。システムは、複数の部分のキットの形態で提供され得る。

【０１０６】

複数部分のキットにおいて、当該方法を行うための電子供与体、電子受容体及び溶媒並びに他の試薬は、独立してキットに含まれ得る。１以上の電子供与体、電子受容体及び溶媒は、当業者が識別できる１以上の組成物中に単独で又は混合物で含まれ得る。１以上の電子供与体、電子受容体及び溶媒の各々は、適当な媒体とともに組成物中に存在し得る。

【０１０７】

更なる試薬には、本明細書に記載された任意の態様に従う接触を増強するか又は有利に働くのに適当な分子、並びに／或いは、圧力、温度、場合によっては他の適当な条件の検出を可能にする分子、標準及び／又は装置を含み得る。

【０１０８】

特には、当該キットの構成要素は、本明細書に記載された方法を実施するために適当な指示及び他の必要な試薬を具備していてもよい。キットは、通常、別々の容器に組成物を含む。試験を行うための指示、例えば、書面若しくは音声指示、紙上又はテープ若しくはＣＤ－ＲＯＭ等の電子的なサポートが、通常、キット中に含まれるであろう。キットは更に、使用する特定の方法に応じて、他の密封された試薬及び物質（例えば、洗浄緩衝液等）を含み得る。

【０１０９】

いくつかの態様において、本明細書に記載された電子供与体、電子受容体及び溶媒は、当業者が識別することのできる適当な賦形剤又は希釈剤とともに、組成物中に含まれ得る。

【０１１０】

本明細書に記載された配合、組成物、方法及びシステムは、水素貯蔵、芳香族化合物中への水素、ＣＯ２、メタン等の気体の貯蔵における研究を含む、数々の用途に使用され得る。いくつかの態様において、本明細書に記載された配合、組成、方法及びシステムは、これらの水素貯蔵物質中への水素ガスのより高い吸収を可能にすると考えられている。水素自動車において、例えば、多量の水素が自動車に動力を供給すべく、安全に貯蔵される必要があり、より良好な水素貯蔵物質は、自動車をより長く走らせるであろう。更には、CO_2ガスが大気中から回収され、フレームワーク中に貯蔵され、温室効果を低減する可能性がある。

【０１１１】

本明細書に記載された他の産業プロセス、配合、組成物、方法及びシステムは、有用であると予想されており、これは、塩素を取り扱うプロセス（例えば、ＰＶＣの製造）を含み、多くの場合、～９９％の純度で廃棄物水素を生ずる。この廃棄物水素は、典型的には、圧縮による貯蔵のコストのために燃やされるが、本明細書に記載する通り、代わりに貯蔵することができる。

【０１１２】

本開示の更なる利点及び特徴は、説明のみを目的とした実験セクションを参照して、以下の詳細な開示からより明らかとなるであろう。

【実施例】

【０１１３】
本明細書に記載された組成物、方法、システムについて、以下の例で更に説明されるが、例は、説明を目的として提供され、限定を意図するものではない。
【０１１４】
特には、以下の例は、典型的なＳＥＳ並びに関連する方法及びシステムについて説明する。当業者は、本開示の態様に従う更なる溶液、方法及びシステムに対して、このセクションで詳細に記載する特徴を採用するための、適用性及び必要な変更について理解するであろう。
【０１１５】
例１：溶媒和電子溶液
アルカリ金属（ＡＭ）及び他の電子供与金属イオンは、ナフタレン等の多環式芳香族炭化水素（ＰＡＨ）を含む種々の分子を含んだ溶媒和電子（ＳＥ）溶液を形成する。多くの多環式芳香族炭化水素は、室温で固体であり、従って、適切な溶媒中に溶解させて提供することができる。溶媒和電子錯体は、電子供与金属を、多環式芳香族炭化水素溶液、例えばナフタレンのテトラヒドロフラン溶液に溶解することにより形成することができる。溶液は、溶媒和電子錯体に特有の青緑色を有する。
【０１１６】
アルカリ金属（ＡＭ）及び他の電子供与金属イオンは、種々の溶媒を含んだ有機金属溶液を形成し、溶媒としては、ヘキサン、ベンゼン、シクロヘキサン及びジエチルエーテル等の炭化水素が挙げられる。
【０１１７】
例２：溶媒和電子溶液の実施
リチウムは、多環式芳香族炭化水素の高い電子親和性のため、ナフタレン又はビフェニル等の多環式芳香族炭化水素を含んだ溶液中に溶解し得ることが知られている。ビフェニル及びナフタレンの双方についての、溶媒和電子を形成する反応は、下記の組成に関する反応式＜反応式６＞及び＜反応式７＞に示される。しかしながら、かかるリチウム溶液は、特に空気及び水との非常に高い反応性のため、商業的水素貯蔵及び発生の用途には使用されない。
【化５】

$$2Li_{(金属)} + ビフェニル \rightarrow [2Li^{+}, (2e^{-}, ビフェニル)] \qquad <反応式6>$$

$$2Li_{(金属)} + ナフタレン \rightarrow [2Li^{+}, (2e^{-}, ナフタレン)] \qquad <反応式7>$$

【０１１８】
４つのリチウムナフタレン系の溶媒和電子溶液を、ＴＨＦ溶媒中で調製し、表１中の１～４のラベルを付した。
【０１１９】

【表１】

表1:THF溶媒中でリチウムとナフタレンを用いて調製した種々の溶媒和電子溶液

	Li (グラム)	Li(モル) Li/Naph	ナフタレン (グラム)	ナフタレン (モル)	THF (グラム)	THF (モル)	結果 (溶解、不溶、凝固)
1	0.135	0.194 1.94	1.28	.010 THF/ナフタレン=12.2	8.8	.122	溶解の後、凝固
2	.597	.086 2	5.5	.0429 THF/ナフタレン=2.8	8.8	.122	溶解の後、凝固
3	.459	.0661 0.99	8.4	.0655 THF/ナフタレン=1.86	8.8	.122	溶解
4	.270	.0389 3.89	1.28	.010 THF/ナフタレン=12.2	8.8	.122	不溶

NAHに対するリチウムの最大量:2～1(試料1及び2)
THFに対する溶解したリチウムの最大量:2～3(試料2)
THFに溶解したNAHの最大:1～2(試料3)

【０１２０】
各々の溶液におけるＬｉ、ナフタレン及びＴＨＦの質量及びモル量を、モル比とともに表に示す。３つのＬｉ／ナフタレンモル比：１、２、及び４を目標とした。表中の「凝固」及び「不溶」の語は、それぞれ、溶液の凝固又はリチウムの溶媒和電子液への不完全な溶解のため、固相が観察された溶液を指す。

【０１２１】
クラウンエーテルは、ＬｉＦを含む無機フッ化物の溶解を増強する有利な化学的及び物理的性質を示すカチオン受容体のクラスを指す。これらの化合物は、溶液中で金属イオンと錯体形成するのに有用である。本開示におけるクラウンエーテルカチオン受容体としては、限定するものではないが、ベンゾ－１５－クラウン－５、１５－クラウン－５、１８－クラウン－６、シクロヘキシル－１５－クラウン－５、ジベンゾ－１８－クラウン－６、ジシクロヘキシル－１８－クラウン－６、ジ－t－ブチルベンゾ－１８－クラウン－６、４，４i⁻（５i⁻）-ジ－tert－ブチルジベンゾ－２４－クラウン－８、４－アミノベンゾ－１５－クラウン－５、ベンゾ－１５－クラウン－５、ベンゾ－１８－クラウン－６、４－tert－ブチルベンゾ－１５－クラウン－５、４－tert－ブチルシクロヘキサノ－１５－クラウン－５、１８－クラウン－６、シクロヘキサノ－１５－クラウン－５、ジ－２，３－ナフト－３０－クラウン－１０、４，４’（５’）－ジ－tertブチルジベンゾ１８－クラウン－６、４’－（５’）－ジ－tert－ブチルジシクロヘキサノ－１８－クラウン－６、４，４’（５’）－ジ－tertブチルジシクロヘキサノ－２４－クラウン－８、４，１０－ジアザ－１５－クラウン－５、ジベンゾ－１８－クラウン－６、ジベンゾ－２１－クラウン－７、ジベンゾ－２４－クラウン－８、ジベンゾ－３０－クラウン－１０、ジシクロヘキサノ－１８－クラウン－６、ジシクロヘキサノ－２１－クラウン－７、ジシクロヘキサノ－２４－クラウン－８、２，６－ジケト－１８－クラウン－６、２，３－ナフト－１５－クラウン－５、４’－ニトロベンゾ－１５－クラウン－５、テトラアザ－１２－クラウン－４テトラヒドロクロライド、テトラアザ－１２－クラウン－４テトラヒドロゲ

ンサルフェート、１，４，１０，１３－テトラオキサ－７，１６－ジアザシクロオクタデカン、１２－クラウン－４、１５－クラウン－５及び２１－クラウン－７が挙げられる。

【０１２２】

（ｉｖ）イオン液体

金属オキシド溶解に有用なイオン液体としては、限定するものではないが、以下のものが挙げられる：

【０１２３】

アセテート：１－ブチル－３－メチルイミダゾリウムトリフルオロアセテート、１－ブチル－１－メチルピロリジニウムトリフルオロアセテート、１－エチル－３－メチルイミダゾリウムトリフルオロアセテート及びメチルトリオクチルアンモニウムトリフルオロアセテート。

【０１２４】

アミド及びイミド：１－ブチル－２，３－ジメチルイミダゾリウムビス（トリフルオロメチルスルホニル）イミド、１－ブチル－３－メチルイミダゾリウムビス（トリフルオロメチルスルホニル）イミド、４９００１５　１－ブチル－３－メチルイミダゾリウムジシアンアミド、１－ブチル－１－メチルピロリジニウムビス（トリフルオロメチルスルホニル）イミド、１－ブチル－１－メチルピロリジニウムビス（トリフルオロメチルスルホニル）イミド、１－ブチル－１－メチルピロリジニウムビス（トリフルオロメチルスルホニル）イミド、１－ブチル－１－メチルピロリジニウムジシアンアミド、２，３－ジメチル－１－プロピルイミダゾリウムビス（トリフルオロメチルスルホニル）イミド、１－（２－エトキシエチル）－１－メチルピロリジニウムビス（トリフルオロメチルスルホニル）イミド及びＮ－エトキシメチル－Ｎ－メチルモルホリニウムビス（トリフルオロメチルスルホニル）イミド。

【０１２５】

ボレート：１－ブチル－２，３－ジメチルイミダゾリウムテトラフルオロボレート、１－ブチル－３－メチルイミダゾリウムテトラフルオロボレート、１－ブチル－３－メチルイミダゾリウムテトラフルオロボレート、Ｎ－ブチル－３－メチルピリジニウムテトラフルオロボレート、Ｎ－ブチル－４－メチルピリジニウムテトラフルオロボレート、１－ブチル－１－メチルピロリジニウムビス［オキサレート（２－）］ボレート、４９００５１　Ｎ－ブチルピリジニウムテトラフルオロボレート、１－エチル－３－メチルイミダゾリウムビス［オキサレート（２－）－０，０＋］ボレート、１－エチル－３－メチルイミダゾリウムテトラフルオロボレート及び１－ヘキシル－３－メチルイミダゾリウムテトラフルオロボレート。

【０１２６】

シアネート：１－ブチル－３－メチルイミダゾリウムジシアンアミド、Ｎ－ブチル－３－メチルピリジニウムジシアンアミド、１－ブチル－１－メチルピロリジニウムジシアンアミド及び１－エチル－３－メチルイミダゾリウムチオシアネート。

【０１２７】

ハロゲニド：１－ベンジル－３－メチルイミダゾリウムクロライド、１－ブチル－１－メチルピロリジニウムブロミド、Ｎ－ブチル－３－メチルピリジニウムブロミド、１－ブチル－２，３－ジメチルイミダゾリウムクロライド、１－ブチル－２，３－ジメチルイミダゾリウムアイオダイド、４９００８７　１－ブチル－３－メチルイミダゾリウムブロミド、１－ブチル－３－メチルイミダゾリウムクロライド、１－ブチル－３－メチルイミダゾリウムアイオダイド、Ｎ－ブチル－３－メチルピリジニウムクロライド及びＮ－ブチル－４－メチルピリジニウムクロライド。

【０１２８】

その他：１－ブチル－３－メチルイミダゾリウムトリシアノメタン、Ｎ－ブチル－３－メチルピリジニウムジシアンアミド、１－ブチル－１－メチルピロリジニウムジシアンアミド及び１－エチル－３－メチルイミダゾリウムヒドロゲンサルフェート。

【０１２９】

ホスフェート及びホスフィネート：Ｎ－ブチル－３－メチルピリジニウムヘキサフルオロホスフェート、１－ブチル－２，３－ジメチルイミダゾリウムヘキサフルオロホスフェート、１－ブチル－３－メチルイミダゾリウムヘキサフルオロホスフェート、１－ブチル－３－メチルイミダゾリウムヘキサフルオロホスフェート、１－ブチル－３－メチルイミダゾリウムヘキサフルオロホスフェート、１－ブチル－１－メチルピロリジニウムトリス（ペンタフルオロエチル）トルフルオロホスフェート、１－ブチル－１－メチルピロリジニウムトリス（ペンタフルオロエチル）トリフルオロホスフェート、１，３－ジメチルイミダゾリウムジメチルホスフェート、１－エチル－３－メチルイミダゾリウムジエチルホスフェート及びグアニジウムトリス（ペンタフルオロエチル）トリフルオロホスフェート。

【０１３０】

サルフェート及びスルホナート：１－ブチル－３－メチルイミダゾリウムメタンスルホナート、Ｎ－ブチル－３－メチルピリジニウムトリフルオロメタンスルホナート、１－ブチル－２，３－ジメチルイミダゾリウムトリフルオロメタンスルホナート、１－ブチル－３－メチルイミダゾリウムヒドロゲンサルフェート、１－ブチル－３－メチルイミダゾリウムメチルサルフェート、１－ブチル－３－メチルイミダゾリウムオクチルサルフェート、１－ブチル－３－メチルイミダゾリウムトリフルオロメタンスルホナート、１－ブチル－３－メチルイミダゾリウムトリフルオロメタンスルホネート、１－ブチル－３－メチルイミダゾリウムトリフルオロメチルスルホナート及びＮ－ブチル－３－メチルピリジニウムメチルサルフェート。

【０１３１】

アンモニウム：Ｎ－エチル－Ｎ，Ｎ－ジメチル－２－メトキシエチルアンモニウムビス（トリフルオロメチルスルホニル）イミド、エチル－ジメチル－プロピルアンモニウムビス（トリフルオロメチルスルホニル）イミド、エチル－ジメチル－プロピルアンモニウムビス（トリフルオロメチルスルホニル）イミド、（２－ヒドロキシエチル）トリメチルアンモニウムジメチルホスフェート、メチルトリオクチルアンモニウムビス（トリフルオロメチルスルホニル）イミド、メチルトリオクチルアンモニウムトリフルオロアセテート、メチルトリオクチルアンモニウムトリフルオロメタンスルホナート、テトラブチルアンモニウムビス（トリフルオロメチルスルホニル）イミド、テトラメチルアンモニウムビス（オキサレート（２－））－ボレート及びテトラメチルアンモニウムトリス（ペンタフルオロエチル）トリフルオロホスフェート。

【０１３２】

グアニジウム：グアニジウムトリフルオロメタンスルホナート、グアニジウムトリス（ペンタフルオロエチル）トリフルオロホスフェート及びヘキサメチルグアニジウムトリス（ペンタフルオロエチル）トリフルオロホスフェート。

【０１３３】

イミダゾール：１－ベンジル－３－メチルイミダゾリウムクロライド、１－ブチル－３－メチルイミダゾリウムメタンスルホナート、１－ブチル－２，３－ジメチルイミダゾリウムビス（トリスフルオロメチルスルホニル）イミド、１－ブチル－３－メチルイミダゾリウムビス（トリフルオロメチルスルホニル）イミド、１－ブチル－３－メチルミダゾリウムブロミド、１－ブチル－３－メチルイミダゾリウムクロライド、１－ブチル－３－メチルイミダゾリウムジシアンアミド、１－ブチル－３－メチルイミダゾリウムヘキサフルオロホスフェート、１－ブチル－３－メチルイミダゾリウムヘキサフルオロホスフェート、１－ブチル－３－メチルイミダゾリウムヘキサフルオロホスフェート、１－ブチル－２，３－ジメチルイミダゾリウムクロライド、１－ブチル－２，３－ジメチルイミダゾリウムヘキサフルオロホスフェート、１－ブチル－２，３－ジメチルイミダゾリウムアイオダイド、１－ブチル－２，３－ジメチルイミダゾリウムテトラフルオロボレート、１－ブチル－２，３－ジメチルイミダゾリウムトリフルオロメタンスルホナート、２，３－ジメチル－１－プロピルイミダゾリウムビス（トルフルオロメチルスルホニル）イミド、１－エチル－２，３－ジメチルイミダゾリウムクロライド、１－ヘキシル－２，３－ジメチルイ

ミダゾリウムクロライド、１－ヘキシル－２，３－ジメチルイミダゾリウムトリス（ペンタフルオロエチル）トリフルオロホスフェート及び１－（２－ヒドロキシエチル）－３－メチルイミダゾリウムビス（トリフルオロメチルスルホニル）イミド。

【０１３４】

ホスホニウム：トリヘキシル（テトラデシル）ホスホニウムビス［オキサレート（２－）］ボレート、トリヘキシル（テトラデシル）ホスホニウムビス（トリフルオロメチルスルホニル）イミド、トリヘキシル（テトラデシル）ホスホニウムトリス（ペンタフルオロエチル）トリフルオロホスフェート及びトリヘキシル（テトラデシル）ホスホニウムトリス（ペンタフルオロエチル）トリフルオロホスフェート。

【０１３５】

ピリジン：Ｎ－ブチル－３－メチルピリジニウムブロミド、Ｎ－ブチル－３－メチルピリジニウムヘキサフルオロホスフェート、Ｎ－ブチル－３－メチルピリジニウムトリフルオロメタンスルホナート、Ｎ－ブチル－３－メチルピリジニウムクロライド、Ｎ－ブチル－４－メチルピリジニウムクロライド、Ｎ－ブチル－３－メチルピリジニウムジシアンアミド、Ｎ－ブチル－３－メチルピリジニウムメチルサルフェート、Ｎ－ブチル－３－メチルピリジニウムテトラフルオロボレート、Ｎ－ブチル－４－メチルピリジニウムテトラフルオロボレート及びＮ－ブチルピリジニウムクロライド。

【０１３６】

ピロリジン：１－ブチル－１－メチルピロリジニウムブロミド、１－ブチル－１－メチルピロリジニウムビス［オキサレート（２－）］ボレート、１－ブチル－１－メチルピロリジニウムビス（トリフルオロメチルスルホニル）イミド、１－ブチル－１－メチルピロリジニウムビス（トリフルオロメチルスルホニル）イミド、１－ブチル－１－メチルピロリジニウムビス（トリフルオロメチルスルホニル）イミド、１－ブチル－１－メチルピロリジニウムクロライド、１－ブチル－１－メチルピロリジニウムジジアンアミド、１－ブチル－１－メチルピロリジニウムジジアンアミド、１－ブチル－１－メチルピロリジニウムトリフルオロアセテート及び１－ブチル－１－メチルピロリジニウムトリフルオロメタンスルホナート。

【０１３７】

クラウンエーテルは、$(Li/Na)_2O_x$の溶解を増強するのに有利な化学的及び物理的性質を示す、カチオン受容体のクラスである。これらの化合物は、溶液中での金属イオンとの錯体形成に有用である。有用なクラウンエーテルカチオン受容体としては、１２－クラウン－４、１５－クラウン－５、１８－クラウン－６及び他のベンゾ－クラウン－エーテル並びにシクロヘキシル－クラウンエーテル誘導体が挙げられる。

【０１３８】

例３：種々の濃度の金属供与体、金属受容体及び溶媒を含んだ典型的な溶媒和電子溶液

種々のリチウムナフタレンテトラヒドロフラン

【化６】

$$Li_n(Naph)_m(THF)_q \rightarrow SES$$

溶液を以下のようにして調製した。

【０１３９】

溶液１（１：１：１２．３３溶液）：１２．８ｇ（０．１モル）のナフタレンをアルゴン雰囲気中、磁気的攪拌下、乾燥ＴＨＦ９０mlに添加する。ナフタレンは直ちにＴＨＦに溶解する。次いで、アルゴン中での攪拌を維持しながら、リチウムホイル０．７ｇ（０．１モル）を溶液に添加する。リチウムをナフタレン－ＴＨＦ溶液中に溶解し、約１～２時間後ＳＥＳを形成する。ＳＥＳは暗色を呈する。ＴＨＦを添加し、ＳＥＳ総量を１００ｍｌとする。溶液１は、１モル／ｌのＬｉ、１モル／ｌのナフタレン及び１２．３３モル／ｌのＴＨＦを含み、故に、表示は１：１：１２．３３である。

【０１４０】
溶液２（２：１：１２．３３）
リチウム１．４gを０．７gの代わりに使用すること以外、溶液１と同じ条件で、溶液２を調製する。
【０１４１】
溶液３（１：２：１２．３３）
ナフタレン２５．６gを１２．８gの代わりに使用すること以外、溶液１と同じ条件で、溶液３を調製する。
【０１４２】
溶液４（２：２：１２．３３）
ナフタレン２５．６gを１２．８gの代わりに使用し、リチウム１．４gを０．７gの代わりに使用すること以外、溶液１と同じ条件で、溶液４を調製する。
【０１４３】
溶液５（４：２：１２．３３）
リチウム２．８gを１．４gの代わりに使用すること以外、溶液４と同じ条件で、溶液５を調製する。
【０１４４】
溶液６（６：３：１２．３３）
ナフタレン３８．４５gを１２．８gの代わりに使用し、リチウム４．２gを０．７gの代わりに使用すること以外、溶液１と同じ条件で、溶液６を調製する。
【０１４５】
２５℃におけるナフタレンのＴＨＦへの溶解度は、６．６３９モル／lと決定されている［参考文献１２］。出願人の結果は、最大で２Ｌｉモルまでがナフタレン１モルと反応し得ることを示す。従って、モル組成$Li_{13.278}Naph_{6.639}THF_{12.33}$は、最も高いＬｉ及びナフタレン濃度によって達成されると予想される。更に、リチウムに関しては、２５℃で、１３．２８モル－Ｌｉ／リットル－ＴＨＦである。最大で約１５モル／リットルが、より高い温度で達成され得る。
【０１４６】
溶液７：カリウム－ナフタレン－ＴＨＦ（２：１：１２．３３）：約７．８gのカリウムを、０．７gのリチウムの代わりに使用すること以外、溶液１と同じ条件で、溶液７を調製した。溶液は、黒色であった。
【０１４７】
例４：典型的な金属有機ラジカル溶液
金属有機ラジカル溶液は、種々の会社より、化学薬品からすぐに使用できる状態で購入することができる。購入することのできる典型的な有機ラジカル溶液は、有機リチウム溶液、例えば、ジエチルエーテル中メチルリチウムリチウムアイオダイド錯体１．０Ｍ（CH_3ILi_2）、ジエチルエーテル中のリチウムアイオダイド溶液０．５Ｍとの錯体としてのメチル－d_3－リチウム（CD_3Li・ＬｉＩ）、メチルリチウムリチウムブロマイド錯体溶液（CH_3Li・ＢｒＬｉ）、ジエトキシメタン中のメチルリチウム溶液３．０Ｍ（CH_3Li）、ジエチルエーテル中のメチルリチウム溶液１．６Ｍ CH_3Li、２－メチルテトラヒドロフラン／クメン中のメチルリチウム溶液３％（CH_3Li）、ベンゼン：シクロヘキサン中のエチルリチウム溶液０．５Ｍ（C_2H_5Li）、ペンタン中のイソプロピルリチウム溶液０．７Ｍ（C_3H_7Li）、ＴＨＦ中の２－チエニルリチウム溶液１．０Ｍ（C_4H_3LiS）、シクロヘキサン中のブチルリチウム溶液２．０Ｍ（C_4H_9Li）、ヘプタン中のブチルリチウム溶液purum～２．７Ｍ（C_4H_9Li）、ヘキサン中のブチルリチウム溶液１０．０Ｍ（C_4H_9Li）、ヘキサン中のブチルリチウム溶液２．５Ｍ（C_4H_9Li）、ヘキサン中のブチルリチウム溶液１．６Ｍ（C_4H_9Li）、ペンタン中のブチルリチウム溶液２．０Ｍ（C_4H_9Li）、ヘキサン中のブチルリチウム溶液～１．６Ｍ（C_4H_9Li）、トルエン中のブチルリチウム溶液テクニカル（technical）～２．５Ｍ（C_4H_9Li）、ヘプタン中のイソブチルリチウム溶液テ

クニカル（technical）～１６％（～１．７Ｍ）（C_4H_9Li）、シクロヘキサン中のｓｅｃ－ブチルリチウム溶液１．４Ｍ（C_4H_9Li）、ヘプタン中のｔｅｒｔ－ブチルリチウム溶液purum １．６～３．２Ｍ（C_4H_9Li）、ペンタン中のｔｅｒｔ－ブチルリチウム溶液１．７Ｍ（C_4H_9Li）、ペンタン中のｔｅｒｔ－ブチルリチウム溶液テクニカル（technical）～１．７Ｍ（C_4H_9Li）、リチウムアセチリドエチレンジアミン錯体テクニカル（technical）≧９０％（Ｔ）（$C_4H_9LiN_2$）、リチウムアセチリド、エチレンジアミン錯体９０％（$C_4H_9LiN_2$）、リチウムアセチリド、トルエン中のエチレンジアミン錯体２５重量％スラリ（$C_4H_9LiN_2$）、ペンタン中の（トリメチルシリル）メチルリチウム溶液１．０Ｍ（$C_4H_{11}LiSi$）、シクロペンタンジエニルリチウム９７％（C_5H_5Li）、ＴＨＦ中のリチウム（トリメチルシリル）アセチリド溶液purum～０．５Ｍ（C_5H_9LiSi）、ＴＨＦ中のリチウム（トリメチルシリル）アセチリド溶液０．５Ｍ（C_5H_9LiSi）、シクロヘキサン／トルエン中のネオペンチルリチウム溶液０．６Ｍ（$C_5H_{11}Li$）、ヘプタン中のペンチルリチウム溶液２．２Ｍ（$C_5H_{11}Li$）、ジブチルエーテル中のフェニルリチウム溶液１．８Ｍ（C_6H_5Li）、ヘキサン中のヘキシルリチウム溶液２．３Ｍ（$C_6H_{13}Li$）、ＴＨＦ中のリチウムフェニルアセチリド１．０Ｍ溶液（C_8H_5Li）、ヘプタン中の２－（エチルヘキシル）リチウム溶液３０～３５重量％（$C_8H_{17}Li$）、リチウムテトラメチルシクロペンタジエニド（$C_9H_{13}Li$）及びリチウムペンタメチルシクロペンタジエニド（$C_{10}H_{15}Li$）等である。これらの有機リチウム溶液は、シグマアルドリッチから購入することができ、本願の出願日において、以下のウェブページの製品要覧に列挙される：sigmaaldrich.com/chemistry/chemistry-products.html?TablePage=16245216。

【０１４８】

出願人は、ブチルリチウムのヘキサン溶液１０Ｍを使用した。溶液は、種々の実験セットにおいて希釈され、５Ｍ、２Ｍ及び１Ｍの溶液を作製した。

【０１４９】

有機金属化合物のアルドリッチカタログからの有機ラジカル溶液の更なる例は、有機ケイ素、例えば、ジシラン：１，１，２，２－テトラメチルジシラン９８％($C_4H_{14}Si_2$)、１，２－ジメトキシ－１，１，２，２－テトラメチルジシラン９７％（$C_6H_{18}O_2Si_2$)、１，２－ジエトキシ－１，１，２，２－テトラメチルジシラン９７％($C_8H_{22}Si_2O_2$)、１，２－ビス（２－メトキシフェニル）－１，１，２，２－テトラメチルジシラン９６％（$C_{18}H_{26}O_2Si_2$）、１，２－ジメチル－１，１，２，２－テトラフェニルジシラン９７％（$C_{26}H_{26}Si_2$）、ヘキサメチルジシラン９８％（$C_6H_{18}Si_2$）、ヘキサメチルジシランワッカー品質（Wacker quality）≧９８．０％（ＧＣ）($C_6H_{18}Si_2$)、ペンタメチルジシラン９７％（$C_5H_{16}Si_2$）、シラノール：メチルシラノール≧９８．５％（ＧＣ）($C_3H_{10}OSi$)、２－フリルジメチルシラノレートナトリウム$C_6H_9NaO_2Si$、ジメチル（２－チエニル）シラノール９７％（$C_6H_{10}OSSi$)、ｔｅｒｔ－ブチルジメチルシラノールpurum ≧９８．０％（ＧＣ）（$C_6H_{16}OSi$）、ｔｅｒｔ－ブチルジメチルシラノール９９％（$C_6H_{16}OSi$）、トリエチルシラノールpurum ≧９８．０％（ＧＣ）$C_6H_{16}OSi$、トリエチルシラノール９７％$C_6H_{16}OSi$、（３，４－ジヒドロ－２Ｈ－ピラン－６－イル）ジメチルシラノール９５％ $C_7H_{14}O_2Si$、ジメチルフェニルシラノレートヒドレートナトリウム９７％$C_8H_{11}NaOSi \cdot xH_2O$、ジメチルフェニルシラノール９５％$C_8H_{12}OSi$、（４－メトキシフェニル）ジメチルシラノール９６％$C_9H_{14}O_2Si$、トリイソプロピルシラノール９８％$C_9H_{22}OSi$、１，４－ビス（ヒドロキシジメチルシリル）ベンゼン９５％$C_{10}H_{18}O_2Si_2$、（Ｎ－Ｂｏｃ－２－ピロリル）ジメチルシラノール９７％$C_{11}H_{19}NO_3Si$、ジフェニルシランジオール９５％$C_{12}H_{12}O_2Si$、成膜システムにおける使用のために包装されたトリス（ｔｅｒｔ－ブトキシ）シラノール，微量金属に基づき９９．９９９％$C_{12}H_{28}O_4Si$、成膜システムにおける使用のために包装されたトリス（ｔｅｒｔ－ペントキ

シ）シラノール，微量金属に基づき≧９９．９９％$C_{15}H_{34}O_4Si$、トリフェニルシラノール９８％$C_{18}H_{16}OSi$、シラザン：１，１，３，３－テトラメチルシジラザン９７％$C_4H_{15}NSi_2$、ヘキサメチルジシラザン$C_6H_{19}NSi_2$、ヘキサメチルジシラザン半導体等級ＰＵＲＡＮＡＬ（商標）(Ｈｏｎｅｙｗｅｌｌ １７７１３) $C_6H_{19}NSi_2$、ヘキサメチルジシラザンpuriss. p.a.,ＧＣ用,≧９９．０％（ＧＣ）$C_6H_{19}NSi_2$、ヘキサメチルジシラザンpurum, ≧９８.０％（ＧＣ）$C_6H_{19}NSi_2$、ヘキサメチルジシラザンワッカー品質, ≧９７．０％（ＧＣ）$C_6H_{19}NSi_2$、ヘキサメチルジシラザンＲｅａｇｅｎｔＰｌｕｓ（登録商標）,９９．９％ $C_6H_{19}NSi_2$、ヘキサメチルジシラザン試薬等級,≧９９％$C_6H_{19}NSi_2$、２，２，４，４，６，６－ヘキサメチルシクロトリシラザン９７％$C_6H_{21}N_3Si_3$、１，３－ジエチル－１，１，３，３－テトラメチルジシラザン＞９８．０％ $C_8H_{23}NSi_2$、２，４，６－トリメチル－２，４，６－トリビニルシクロトリシラザン テクニカル（technical）,≧９０％ $C_9H_{21}N_3Si_3$、１，１，３，３－テトラメチル－１，３－ジフェニルジシラザン ９６％ $C_{16}H_{23}NSi_2$、１，３－ジメチル－１，１，３，３－テトラフェニルジシラザンpurum,≧９８．０％（ＮＴ）$C_{26}H_{27}NSi_2$、シリケート：テトラメチルオルトシリケート成膜等級,≧９８％,≧９９．９％ 微量金属基づき$C_4H_{12}O_4Si$、テトラメチルオルトシリケートpuriss.,≧９９．０％（ＧＣ）$C_4H_{12}O_4Si$、テトラメチルオルトシリケート≧９９％$C_4H_{12}O_4Si$、テトラメチルオルトシリケートpurum,≧９８．０％（ＧＣ）$C_4H_{12}O_4Si$、テトラメチルオルトシリケート９８％ $C_4H_{12}O_4Si$、テトラメチル－d_{12}オルトシリケート９９原子％ D $C_4D_{12}O_4Si$、テトラエチルオルトシリケート ９９．９９９％微量金属基準 $C_8H_{20}O_4Si$、テトラエチルオルトシリケート puriss.,≧９９．０％（ＧＣ）$C_8H_{20}O_4Si$、テトラエチルオルトシリケートＲｅａｇｅｎｔＰｌｕｓ（登録商標）,≧９９％$C_8H_{20}O_4Si$、テトラエチルオルトシリケート試薬等級,９８％$C_8H_{20}O_4Si$、テトラキス（ジメチルシリル）オルトシリケートpurum,≧９７．０％（ＧＣ）$C_8H_{28}O_4Si_5$、テトラキス（ジメチルシリル）オルトシリケート９６％$C_8H_{28}O_4Si_5$、テトラアリルオルトシリケート テクニカル（technical），≧８５％（ＧＣ）$C_{12}H_{20}O_4Si$、テトラプロピルオルトシリケート≧９８％,成膜等級$C_{12}H_{28}O_4Si$、テトラプロピルオルトシリケート９５％$C_{12}H_{28}O_4Si$、テトラブチルオルトシリケートpurum,≧９７．０％（ＧＣ）$C_{16}H_{36}O_4Si$、テトラブチルオルトシリケート９７％ $C_{16}H_{36}O_4Si$，；シロキサン メトキシトリメチルシランpurum,≧９７．０％（ＧＣ）$C_4H_{12}OSi$、１，１，３，３－テトラメチルジシロキサン ワッカー品質,≧９８．０％（ＧＣ）$C_4H_{14}OSi_2$、１，１，３，３－テトラメチルジシロキサン ９７％ $C_4H_{14}OSi_2$、２，４，６，８－テトラメチルシクロテトラシロキサン≧９９．５％,≧９９．９９９％微量金属基準 $C_4H_{16}O_4Si_4$、２，４，６，８－テトラメチルシクロテトラシロキサンテクニカル（technical），≧９５％（ＧＣ）$C_4H_{16}O_4Si_4$、２－クロロエトキシトリメチルシラン９８％ $C_5H_{13}ClOSi$、ペンタメチルジシロキサン≧９５．０％ $C_5H_{16}OSi_2$、２，４，６，８，１０－ペンタメチルシクロペンタシロキサン９６％$C_5H_{20}O_5Si_5$、ジメトキシ－メチル（３，３，３－トリフルオロプロピル）シラン≧９７．０％（ＧＣ）$C_6H_{13}F_3O_2Si$、（クロロメチル）－イソプロポキシ－ジメチルシラン９７％$C_6H_{15}ClOSi$、（クロロメチル）メチルジエトキシシラン９７％$C_6H_{15}ClO_2Si$、１，３－ビス（クロロメチル）－１，１，３，３－テトラメチルジシロキサン９９％ $C_6H_{16}Cl_2OSi_2$、イソプロポキシトリメチルシラン９８％$C_6H_{16}OSi$、トリメチル（プロポキシ）シラン９８％ $C_6H_{16}OSi$、ヘキサメチルジシロキサン puriss.,≧９８．５％（ＧＣ）$C_6H_{18}OSi_2$、ヘキサメチルジシロキサンＮＭＲ等級,≧９９．５％ $C_6H_{18}OSi_2$、ヘキサメチルジシロキサン≧９８％ $C_6H_{18}OSi_2$、ポリ（ジメチルシロキサン）ダウコーニングコーポレーション２００（登録商標）液体,粘度０．６５ｃＳｔ（２５℃）$C_6H_{18}OSi_2$、ヘキサメチルシクロトリシロキサン９８％$C_6H_{18}O_3Si_3$、１，３－ジメチルテトラメトキシジシロキサン ９

７％ $C_6H_{18}O_5Si_2$、１，１，３，３，５，５－ヘキサメチルトリシロキサン９５％ $C_6H_{20}O_2Si_3$、１,１,１,３,５,５,５－ヘプタメチルトリシロキサン９７％ $C_7H_{22}O_2Si_3$、１,３－ジビニルテトラメチルジシロキサン ９７％ $C_8H_{18}OSi_2$、１，３－ジエトキシ－１，１，３，３－テトラメチルジシロキサン ９７％ $C_8H_{22}O_3Si_2$、１，７－ジクロロ－オクタメチルテトラシロキサン ９５％ $C_8H_{24}Cl_2O_3Si_4$、オクタメチルトリシロキサン ９８％ $C_8H_{24}O_2Si_3$、ポリ（ジメチルシロキサン）ダウコーニングコーポレーション２００（登録商標）液体,粘度１．０ｃＳｔ（２５℃）$C_8H_{24}O_2Si_3$、オクタメチルシクロテトラシロキサン ９８％ $C_8H_{24}O_4Si_4$、１,１,１,３,５,７,７,７－オクタメチルテトラシロキサン テクニカル（technical），≧９５％（ＧＣ）$C_8H_{26}O_3Si_4$、２,４,６－トリエチル－２,４,６－トリメチルシクロトリシロキサン ９７％ $C_9H_{24}O_3Si_3$、トリス（トリメチルシロキシ）シラン≧９８％ $C_9H_{28}O_3Si_4$、１，３－ジメチルテトラビニルジシロキサン ９７％ $C_{10}H_{18}OSi_2$、トリアルキルシロキサン：トリメトキシシラン ９５％ $C_3H_{10}O_3Si$、トリメトキシシラン テクニカル（technical）,≧９０％（ＧＣ）$C_3H_{10}O_3Si$、トリメトキシメチルシラン 成膜等級，≧

９８％ $C_4H_{12}O_3Si$、トリメトキシメチルシラン purum，≧９８．０％（ＧＣ）$C_4H_{12}O_3Si$、トリメトキシメチルシラン ９８％ $C_4H_{12}O_3Si$、トリメトキシメチルシラン ９５％ $C_4H_{12}O_3Si$、ビニルトリメトキシシラン９８％及び更なる有機ケイ素等であり、更なる有機ケイ素は、シグマアルドリッチから購入することができ、本願の出願日において、以下のウェブページ： www.sigmaaldrich.com/chemistry/chemistry-products .html?TablePage= 16245265に列挙されている。

【０１５０】

本開示において適当な金属有機ラジカル溶液の更なる例は、有機アルミニウムを含み、これは、例えば、ヘキサン中のメチルアルミニウムジクロライド溶液１．０Ｍ CH_3AlCl_2、トルエン中のメチルアルミノキサン溶液１０重量％ CH_3AlO、エチルアルミニウムジクロライド９７％ $C_2H_5AlCl_2$、ヘキサン中のエチルアルミニウムジクロライド溶液１．０Ｍ $C_2H_5AlCl_2$、ヘキサン中のエチルアルミニウムジクロライド溶液１．０Ｍ $C_2H_5AlCl_2$、トルエン中のエチルアルミニウムジクロライド溶液２５重量％ $C_2H_5AlCl_2$、ヘキサン中のエチルアルミニウムジクロライド溶液purum,～１Ｍ、ジメチルアルミニウムクロライド９７％ C_2H_6AlCl、ヘキサン中のジメチルアルミニウムクロライド溶液１．０Ｍ C_2H_6AlCl、トリメチルアルミニウム９７％ C_3H_9Al、成膜システムにおける使用のために包装されたトリメチルアルミニウム C_3H_9Al、クロロベンゼン中のトリメチルアルミニウム溶液２Ｍ C_3H_9Al、ヘプタン中のトリメチルアルミニウム溶液purum,～２Ｍ C_3H_9Al、ヘプタン中のトリメチルアルミニウム溶液２．０Ｍ C_3H_9Al、ヘキサン中のトリメチルアルミニウム溶液２．０Ｍ C_3H_9Al、トルエン中のトリメチルアルミニウム溶液purum,～２Ｍ C_3H_9Al、トルエン中のトリメチルアルミニウム溶液２．０Ｍ C_3H_9Al、ジエチルアルミニウムクロライド９７％ $C_4H_{10}AlCl$、ヘプタン中のジエチルアルミニウムクロライド溶液１．０Ｍ $C_4H_{10}AlCl$、ヘキサン中のジエチルアルミニウムクロライド溶液１．０Ｍ $C_4H_{10}AlCl$、ヘキサン中のジエチルアルミニウムクロライド溶液１．０Ｍ $C_4H_{10}AlCl$、トルエン中のジエチルアルミニウムクロライド溶液２５重量％ $C_4H_{10}AlCl$、トルエン中のジエチルアルミニウムシアニド溶液１．０Ｍ $C_5H_{10}AlN$、トルエン中のジエチルアルミニウムシアニド溶液テクニカル（technical），～１Ｍ $C_5H_{10}AlN$、ジメチルアルミニウムイソプロポキシド≧９９．９９％金属基準,≧９５％ $C_5H_{13}OAl$、トリエチルアルミニウム９３％ $C_6H_{15}Al$、ヘプタン中のトリエチルアルミニウム溶液１．０Ｍ $C_6H_{15}Al$、ヘキサン中のトリエチルアルミニウム溶液１．０Ｍ $C_6H_{15}Al$、ヘキサン中のトリエチルアルミニウム溶液１．０Ｍ $C_6H_{15}Al$、トルエン中のトリエチル

アルミニウム溶液２５重量％ $C_6H_{15}Al$、ジエチルアルミニウムエトキシド９７％ $C_6H_{15}AlO$、トルエン中のジエチルアルミニウムエトキシド溶液２５重量％$C_6H_{15}AlO$、エチルアルミニウムセスキクロライド９７％$C_6H_{15}Al_2Cl_3$、ジイソブチルアルミニウムクロライド９７％$C_8H_{18}AlCl$、ヘキサン中のジイソブチルアルミニウムフルオライド溶液１．０Ｍ $C_8H_{18}AlF$、トルエン中のテトラエチルジアルミノキサン溶液１．０Ｍ $C_8H_{20}Al_2O$ pricing、トリプロピルアルミニウム$C_9H_{21}Al$、トリイソブチルアルミニウム$C_{12}H_{27}Al$、ヘキサン中のトリイソブチルアルミニウム溶液１．０Ｍ $C_{12}H_{27}Al$、トルエン中のトリイソブチルアルミニウム溶液２５重量％$C_{12}H_{27}Al$、トルエン中のトリイソブチルアルミニウム溶液２５重量％$C_{12}H_{27}Al$、ＴＨＦ／ヘキサン中のリチウムジイソブチル－ｔｅｒｔ－ブトキシアルミニウムヒドリド溶液０．２５Ｍ $C_{12}H_{28}AlLiO$、ビス（トリメチルアルミニウム)－１，４－ジアザビシクロ［２．２．２］オクタン付加物$C_{12}H_{30}Al_2N_2$、トルエン中のテトライソブチルジアルミノキサン溶液１０重量％$C_{16}H_{36}Al_2O$、ジブチルエーテル中のトリフェニルアルミニウム溶液１Ｍ $C_{18}H_{15}Al$、ヘキサン中のトリオクチルアルミニウム溶液２５重量％$C_{24}H_{51}Al$及びシグマアルドリッチから購入することのできる更なる有機アルミニウム等であるが、更なる有機アルミニウムは、本願出願日において、以下のウェブページ：www.sigmaaldrich.com/chemistry/chemistry-products.html?TablePage= 16244422に列挙されている。

【０１５１】

本開示において適当な金属有機ラジカル溶液の更なる例は、有機ゲルマニウムを含み、これは、例えば、ジメチルゲルマニウムジクロライド９９％$C_2H_6Cl_2Ge$、トリメチルゲルマニウムブロマイド９８％ C_3H_9BrGe、クロロトリメチルゲルマン９８％ C_3H_9ClGe、ジエチルゲルマニウムジクロライド９７％ $C_4H_{10}C_2Ge$、テトラメチルゲルマニウム ９８％ $C_4H_{12}Ge$、フェニルゲルマニウムトリクロライド９８％ $C_6H_5Cl_3Ge$、ビス（２－カルボキシエチルゲルマニウム（ＩＶ）セスキオキシド） ９９％ $C_6H_{10}Ge_2O_7$、クロロトリエチルゲルマン９６％ $C_6H_{15}ClGe$、トリエチルゲルマニウムヒドリド９８％ $C_6H_{16}Ge$、ヘキサメチルジゲルマニウム(ＩＶ) 工業品質$C_6H_{18}Ge_2$、ジフェニルゲルマニウムジクロライド９５％ $C_{12}H_{10}Cl_2Ge$、トリブチルゲルマニウムヒドリド９９％ $C_{12}H_{28}Ge$、ヘキサエチルジゲルマニウム（ＩＶ）９７％ $C_{12}H_{30}Ge_2$、トリフェニルゲルマニウムクロライド９９％ $C_{18}H_{15}ClGe$、トリフェニルゲルマニウムヒドリド$C_{18}H_{16}Ge$、ヘキサフェニルジゲルマニウム（ＩＶ）９７％ $C_{36}H_{30}Ge_2$、ヘキサフェニルジゲルモキサン９７％ $C_{36}H_{30}Ge_2O$及びシグマアルドリッチから購入することのできる更なる有機ゲルマニウム等であり、本願出願日において、以下のウェブページ：www.sigmaaldrich.com/chemistry/chemistry-products.html?TablePage=16251219に列挙されている。

【０１５２】

例５：H_2から、溶媒和電子溶液への水素貯蔵のためのシステム

図１の略図中に示すシステム（１０）を使用して、水素貯蔵を行った。図１のシステムは、ガスシリンダー調節器（１０５）を介し、格納スペース（１６０）及び一連のバルブ（１５０）、（１５５）、（１７０）及び（１８０）を介して圧力容器（１１０）に流体連結した水素タンク（１００）を含んでおり、さらに、圧力がバラトロン（１３０）及び（１４０）によって検出されている。水素タンク（１００）、格納スペース（１６０）及び圧力容器（１１０）もまた、バルブ（１９０）を介して真空ポンプ（１２０）と流体連結している。図１の図において、格納スペース（１６０）は容積Ｖ１を有し、システムの圧力容器（１１０）を含むセクションは反応器容積Ｖｓを有し、且つ、通常は本発明に記載されたＳＥＳを含み、当該システムのバルブ（１７０）、（１８０）及び（１９０）の間に含まれるセクションは、容積ＶＬを有する。

【０１５３】

運転中、水素は、外気へのバルブ（１５５）と連結したバラトロン（１４０）によって

流入水素の圧力が測定される当該システムの一セクションに位置するバルブ（１５０）を介して、水素タンク（１００）からシステムへと導かれる。最大で３００ｍｌの水素が、格納スペース（１６０）に貯蔵される。バルブ（１７０）及び（１８０）は、ＳＥＳを含んだ圧力容器（１１０）に水素を導く。バラトロン（１３０）は、圧力容器中の圧力変化を測定する。バルブ（１９０）は、典型的には、水素を反応器に導入する前に、気体又は他の流体の流路の真空ポンプ（１２０）によるパージを可能にする。

【０１５４】

システムは、最初に、アルゴンガスで較正された。定量の水素を水素タンク（１００）から圧力容器（１１０）に導入した。バルブ（１５０）を介して水素をシステムに導入し、バラトロン（１４０）によって測定した。格納スペース（１６０）において、水素は、圧力容器（１１０）に導入される前に、システム中で貯蔵された。水素が圧力容器（１１０）に放出される前に圧力容器（１１０）の内部の容積を測定し、Ｖｏｌｓとした。バルブ（１７０）及び（１８０）は、格納スペース（１６０）からの圧力容器（１１０）への水素の放出を制御した。バラトロン（１３０）は、圧力容器（１１０）内の圧力を決定した。水素が圧力容器（１１０）へと導かれたとき、バラトロン（１３０）によって測定した圧力の低下は、ＳＥＳによる水素の吸収又は容器が空の際に行われた予備実験における漏れの存在を示すであろう。

【０１５５】

容積ＶｏｌＳの圧力容器（１１０）は、パール（Paar）社製の酸分解ボンベであり、ＶｏｌＬの「Ｔ」分岐で外れる。システムにおいて漏れがないことを確認した後、溶液を含んだテフロンビーカーを圧力容器（１１０）の内部に設置し、パール社製ボンベの容積には、グローブボックス環境からのアルゴンガスを含む。

【０１５６】

結果を以下の表２及び表３に示し、これらは、Ｖ２容積３２５ｍｌ、真空中Ｂ２＝０及び大気下Ｂ＝１９９で行われた測定を示す。Ｖ２は、反応器の容積（ＶｏｌＳに反応器への流路の容積ＶｏｌＬを加えたもの）である。Ｖｏｌ１と示された容積は、較正された３００ｍｌ容積のステンレス鋼の容積にバルブ（１５０）、（１５５）及び（１７０）の間の流路の容積を加えたものである。

【０１５７】

【表２】

表2:システムの較正

			初期P - 最終P		V1
初期 P1V1+0*V2	5.703517588	5.70(V1)			
最終 P2(V1+V2)	3.060301508	3.06(V1+325)	2.64321608	994.59799	376.28327
初期 P1V1+2.6432*325	5.653266332				
最終 P2(V1+V2)	4.442211055	4.44(V1+325)	1.21105528	449.120603	370.8506224
初期 P1V1+2.6432*325	5.738693467				
最終 P2(V1+V2)	5.115577889	4.44(V1+325)	0.62311558	218.844221	351.2096774
初期 P1V1+2.6432*325	5.728643216				
最終 P2(V1+V2)	5.587939698	4.44(V1+325)	0.14070352	153.517588	1091.071429

【０１５８】

Ｖｏｌ１を加圧し、Ｖ２（ＶｏｌＳに、（１７０）、（１８０）及び（１９０）の間の流路の容積を加えた）を排出した。バルブ（１７０）をあけ、最終的なバラトロンの測定値を記録した。理想気体の法則、ＰＶ＝一定を使用して、Ｖｏｌ１が、第１の運転において３７６ｍｌ、表３の較正の間は３７５ｍｌであると決定した。容積Ｖｏｌ１に３７５ｍｌを使用した。

【０１５９】
【表３】

表3:システムの較正

				初期P - 最終P	V1	
初期 P1V1+0*V2 最終 P2(V1+V2)	3.190954774 1.708542714	3.19(V1) 1.71(V1+325)		1.48241206	555.276382	374.5762712
初期 P1V1+1.71*325	3.266331658					
最終 P2(V1+V2)	2.487437186	4.44(V1+325)		0.77889447	253.140704	325
初期 P1V1+1.71*325	3.256281407					
最終 P2(V1+V2)	2.864321608	4.44(V1+325)		0.3919598	122.487437	312.5

【０１６０】
容積の較正が完了すると、純粋なＴＨＦについてベースラインの測定を行った。
【０１６１】
特には、Ａｒグローブボックス内でパール社製の酸分解ボンベステンレス製反応器に液体を入れることにより、ＴＨＦ溶液１００ｍｌを試験した。反応器は、弁を閉じ、パージした水素ガス流路に連結することのできるグローブボックスから除去した。水素のアリコートを、水素ガスシリンダーから、較正した容積まで導入した。次いでこれらのアリコートを、周囲温度（典型的には、２０～２３℃）でＴＨＦ含有反応器に導入した。反応器の圧力を観察した。圧力の低下が起こらなければ、水素の別のアリコートを、先の圧力よりも高い圧力で較正した容積まで導入した。同じ手順に従って、この更なる水素を反応器に導入した。このプロセスは、反応器中の圧力低下によって示される、水素が液体に吸収された兆候が現れるまで継続した。
【０１６２】
上記アプローチに従って水素が圧力容積（Ｖｓ）に提供された後、圧力低下が認められない限り、圧力は、継続的により高い圧力アリコートにおいて継続的に増加した。圧力が数分間に渡って低下し始めると、関連する測定は、液体による水素吸収を示していると考えられた。理想気体の法則ＰＶ＝ｎＲＴを全てのケースに適用して、吸収の程度を決定した。既知の圧力Ｐ、容積Ｖ及び気体定数Ｒ及び温度Ｔを仮定すると、吸収量ｎを算出することができる。この量は、液体を含んだＳＥＳの質量に規格化することができ、ｙ軸に示すような吸収質量％に換算される。圧力が変化しない場合、水素は吸収されない。圧力容積のガス圧力は、バラトロンゲージによって測定される。データは、（圧力の測定値によって決定される通り）空の容器について更にどれだけ吸収が起こったかの計算を示す。
【０１６３】
結果を以下の表４及び表５に示し、これらは、シリンダーバルブＭＶ１～ＭＶ２の容積＝３２０ｍｌ（Ｖｏｌ１と称す）及び流路＋パールの容積２８４ｍｌ（ＶｏｌＳと称す）を使用して行われた測定を示す。バラトロンの０Ｋｐａでの初期真空設定は、Ｖｏｌ１初期＝１１３５オープンバルブＭＰ１及びＭＰ２　６０５である。
【０１６４】
表４中の初期データセットは、初期圧力アリコートからの純粋なＴＨＦについて行われた。実験の終わりには、圧力容器は、ガス流路装置からはずされ、グローブボックスに戻された。加圧した容器を開け、ＴＨＦをガラス容器に注いだとき、気泡が、ガラス側壁及び底に継続的に形成され、ガラス容器の上部に上昇するのを観察することができた。次いで、同じ溶液を、表５に示す第２のベースラインの運転に使用した。ＴＨＦから水素ガスはおそらく完全にはなくならなかったが、３ｂａｒの水素圧のすぐ上で、水素ガスの吸収を再び観察することができた。

【０１６５】
【表４】

表4:THF実験1

		V1	減少したpv	吸収したH2 ml
初期P1V1		1.52	33	41.91
最終P2(V1+V2)		1.27		
初期P1V1+2.6432*325		2.02	-0.75	-1.305
最終P2(V1+V2)		1.74		
初期P1V1+2.6432*325		2.49	2.25	4.96125
最終P2(V1+V2)		2.205		
初期P1V1+2.6432*325		3	7.125	19.16625
最終P2(V1+V2)		2.69		
初期P1V1+2.6432*325		3	457.125	886.8225
最終P2(V1+V2)		1.94		
初期P1V1+2.6432*325		3.51	-2.25	-6.58125
最終P2(V1+V2)		2.925		
初期P1V1+2.6432*325		4	-7.875	-28.42875
最終P2(V1+V2)		3.61		
初期P1V1+2.6432*325		4.525	-4.875	-20.42625
最終P2(V1+V2)		4.19		
初期P1V1+2.6432*325		5.01	-1.5	-7.0575
最終P2(V1+V2)		4.705		

【０１６６】
【表５－１】

表5:THF実験2

		V1		吸収したH2	累積	累積	重量%
			減少したpv	ml	吸収ml	質量gm	
初期P1V1		1.51	29.25	38.61	38.61	0.00344787	0.003917884
最終P2(V1+V2)		1.32					
初期P1V1+2.6432*325		1.985	-5.625	-9.815625	28.794375	0.00257134	0.002921889
最終P2(V1+V2)		1.745					

【表５－２】

表5:THF実験2

	V1		吸収した H2	累積	累積	重量%
		減少した pv	ml	吸収 ml	質量 gm	
初期 P1V1+2.6432*325	2.505	-9	-20.115	8.679375	0.00077507	0.000880752
最終P2(V1+V2)	2.235					
初期 P1V1+2.6432*325	3	-4.125	-11.22	-2.540625	-0.0002269	-0.00025782
最終P2(V1+V2)	2.72					
初期 P1V1+2.6432*325	3.58	-4.5	-14.6925	-17.233125	-0.0015389	-0.0017488
最終P2(V1+V2)	3.265					
初期 P1V1+2.6432*325	3.58	895.125	1763.39625	1746.16313	0.15593237	0.176882443
最終P2(V1+V2)	1.97					
初期 P1V1+2.6432*325	5.01	-15	-58.425	1687.73813	0.15071501	0.170974239
最終P2(V1+V2)	3.895					

【０１６７】

表４及び表５の説明において、ｐｖの列は、吸収された水素を示す。この値は、バラトロンゲージに示されるように、単純な圧力低下によって示され得る。このデータセットにおいて、この値はｐｖとして表され、圧力低下は、全体の容積の容積倍であった。次いで、ＰＶ値を、代数に使用し、右の列中の量を得た。

【０１６８】

ベースライン実験の結果は、図２の図中のトレース（２１０）によっても説明され、これは、最大で３ａｔｍまでは、ｙ軸に向かうH_2吸収の圧力減少を示さない。３ａｔｍを超える最終圧力の水素が導入されたとき、バラトロンのゲージの圧力はゆっくりと減少し、少量の水素ガスが、単独のＴＨＦに吸収されたことを示す。２４時間後、最終圧力が測定され、更なる水素が、ＴＨＦを単独で含んだ反応器に４ａｔｍまで導入された。更なる水素ガスの吸収は検出されなかった。

【０１６９】

図２の図のトレース（２００）及び（２１０）によって説明される結果は、水素圧が平衡化した後の水素吸収をｙ軸上で示し、低圧では、ガス吸収が観察されないことを示す。特には、トレース（２００）を参照して、ｙ軸のゼロ％吸収近傍に沿う運転は、～３ａｔｍの圧力に達するまで吸収がないことを示す。その時点では、トレース（２１０）に示す通り、吸収が起こると、システムの圧力が減少する。特には、０．１８重量％まで増加する水素吸収を示す、（２１０）で指定したラインによって示される通り、３ａｔｍで閾値が生じた。図２においてライン（２１０）で記載する水素吸収は、表４から外挿される。

【０１７０】

この実験セットで使用するＳＥＳにおいて、溶媒はＴＨＦであった。当業者は、圧力減少及び関連する水素吸収が、ヘキサン又は本明細書に記載された他の任意の溶媒を使用して得られると予測されることを理解するであろう。更なる有機化合物は、更に、水素貯蔵を補助し、更なる有機化合物としては、限定するものではないが、ナフタレン、ジフェニル又は本明細書で記載する多環炭化水素若しくは有機ラジカルが挙げられ、更に、以下の

例も例示される。

【０１７１】

例６：Ｈ$_2$から、カリウムを含んだ溶媒和電子溶液への水素貯蔵のためのシステム

例３で説明した通りに調製した、カリウムをＴＨＦ中に含んだ溶液７を使用し、更なるデータセットを、例５で記載するシステムによって検出した。システムの較正は例５で行ったのと同様にして行う。

【０１７２】

特には、ＳＥＳのＴＨＦ溶液１００ｍｌを、Ａｒグローブボックス中のパール社製酸分解ボンベステンレス製反応器に液体を設置することにより試験した。バルブを閉じて、反応器を、パージした水素ガス流路と連結され得るグローブボックスから除去した。水素ガスシリンダーから、水素のアリコートを較正した容積まで導入した。次いで、これらのアリコートを、ＳＥＳ及びＴＨＦを含んだ反応器に周囲温度（典型的には２０～２３℃）で導入した。反応器の圧力を観察した。圧力低下が起こらない場合は、別の水素アリコートを、較正した容積まで、先の圧力よりもさらに高い圧力で導入した。同じ手順に従って、この更なる水素を反応器に導入した。このプロセスを、反応器内での圧力低下によって示される、水素が液体に吸収される兆候が生ずるまで継続した。

【０１７３】

カリウム溶媒和電子溶液については、圧力６ａｔｍまで吸収は観察されず、その上、吸収は制限された。約８ａｔｍでは、より多量の水素が吸収された。圧力容器のいくらかの超音波処理は、水素の吸収を補助した。１６時間後、水素吸収は減速し、最終的な吸収は、約～１．２重量％であった。図２中のライン（２２０）で示す水素吸収は、表６から外挿される。

【０１７４】

表６に示すデータ（Ｋを使用したＴＨＦの実験３）は、シリンダーバルブＭＶ１からＭＶ２の容積＝３２０ｍｌ（Ｖｏｌ１と称す）及び流路＋パールの容積２８４ｍｌ（ＶｏｌＳと称す）を使用して得られた。

【０１７５】

バラトロンの０Ｐｋａでの初期真空設定は、Ｖｏｌ１初期＝１１３５ｍｌ、開放弁ＭＰ１及びＭＰ２＝６０５ｍｌであった。

【０１７６】

【表６－１】

表6:Kを用いたTHF実験3

時間			減少した pv	吸収した H2 ml	累積 吸収	累積 質量 gm	重量%
	初期P1V1	1.52	33	44.55	44.55	0.00397832	0.004520608
	最終P2(V1+V2)	1.35					
	初期 P1V1+2.6432*325	2.045	-9.375	-16.875	27.675	0.00247138	0.002808305
	最終P2(V1+V2)	1.8					
	初期 P1V1+2.6432*325	2.55	-3.75	-8.53125	19.14375	0.00170954	0.001942618
	最終P2(V1+V2)	2.275					
	初期 P1V1+2.6432*325	3.05	-12.375	-34.4025	-15.25875	-0.0013626	-0.00154844
	最終P2(V1+V2)	2.78					
	初期 P1V1+2.6432*325	3.515	-6.375	-20.71875	-35.9775	-0.0032128	-0.00365103
	最終P2(V1+V2)	3.25					
	初期 P1V1+2.6432*325	4.5	-14.25	-57.78375	-93.76125	-0.0083729	-0.00951554
	最終P2(V1+V2)	4.055					
	初期 P1V1+2.6432*325	5.495	-9	-44.73	-138.49125	-0.0123673	-0.01405569
	最終P2(V1+V2)	4.97					
	初期 P1V1+2.6432*325	6.495	-16.125	-95.94375	-234.435	-0.020935	-0.02379549
	最終P2(V1+V2)	5.95					
	初期	7.49	148.5	989.7525	755.3175	0.06744985	0.076588856

【表６－２】

表6:Kを用いたTHF実験3

時間			減少した pv	吸収した H2 ml	累積 吸収	累積 質量 gm	重量%
	P1V1+2.6432*325						
	最終P2(V1+V2)	6.665					
16 時間							
	初期 P1V1+2.6432*325	8.485	112.5	856.6875	1612.005	0.14395205	0.163314718
	最終P2(V1+V2)	7.615					
1週間							
	初期 P1V1+2.6432*325	7.615	804	5045.1	6657.105	0.59447948	0.671011873
	最終P2(V1+V2)	6.275					
超音波及び1.5時間							
	初期 P1V1+2.6432*325	6.275	165	990	7647.105	0.68288648	0.770031856
	最終P2(V1+V2)	6					
18 時間							
	初期 P1V1+2.6432*325	6	1020	4386	12033.105	1.07455628	1.206356025
	最終P2(V1+V2)	4.3					
4日間							
	初期 P1V1+2.6432*325	4.3	352.5	740.25	12773.355	1.1406606	1.279618744
	最終P2(V1+V2)	2.1					

【０１７７】

水素中のカリウムによる水素吸収は、図２のチャート中のトレース（２３０）によって説明され、ｙ軸に向かうＨ２吸収の圧力低下を最大約８ａｔｍまで示さない。約８ａｔｍを超える最終水素圧力を導入した場合、バラトロンゲージの圧力はゆっくりと低下し、少量の水素ガスがカリウム及びＴＨＦ混合物中に吸収されたことを示した。４日後、最終圧力を測定し、約２ａｔｍで、更なる水素を、ＴＨＦのみを含んだ反応器に導入した。

【０１７８】

例７：H_2から、リチウムを含んだ溶媒和電子溶液中への水素貯蔵のためのシステム

更なるデータセットを、例３で説明する通り調製した、アルカリ金属リチウムをＴＨＦ中に含んだ溶液２を使用して、例５に記載するシステムによって検出した。システムの較正は、例５で行ったのと同様にして行う。更なるデータセットは、例３で説明する通り調製した溶液７を使用して例５で記載するシステムによって検出した。

【０１７９】

Ｌｉ：ナフタレン：ＴＨＦ（モル濃度で１：１：２）は、Ｌｉを溶解させる点で最も良好な実験結果である。Ｌｉ：ナフタレン（２：１：１２）及び（２：１：３）を有する高Ｌｉ濃度は、溶液の固体への一定の凝固をもたらした。

【０１８０】

リチウム溶媒和電子溶液については、吸収が観察されるまでに、１１ａｔｍを超える圧力が必要とされる。吸収は全体的に緩やかであり、測定を１８時間後に停止した。図２のライン（２３０）として記載される水素の吸収は、表６から外挿される。

【０１８１】

表７に示すデータ（Ｋを使用したＴＨＦの実験３）は、シリンダーバルブＭＶ１からＭＶ２の容積＝３２０ｍｌ（Ｖｏｌ１と称す）及び流路＋パールの容積２８４ｍｌ（ＶｏｌＳと称す）を使用して得られた。

【０１８２】

バラトロンの０Ｋｐａにおける初期真空設定は、Ｖｏｌ１初期＝１１３５ｍｌ、開放弁ＭＰ１及びＭＰ２＝６０５ｍｌであった。

【０１８３】

【表７－１】

表7:Liを用いたTHF実験3

			減少したpv	吸収した H2 ml			
初期 P1V1		1.51	29.25	38.75625	38.75625	0.00346093	0.003932724
最終P2(V1+V2)		1.325					
初期 P1V1+2.6432*325		2.02	2.625	4.606875	43.363125	0.00387233	0.004400178
最終P2(V1+V2)		1.755					
初期 P1V1+2.6432*325		2.49	-0.375	-0.830625	42.5325	0.00379815	0.004315896
最終P2(V1+V2)		2.215					

【表７－２】

表7:Liを用いたTHF実験3

		減少したpv	吸収した H2 ml			
初期 P1V1+2.6432*325	3	-2.625	-7.11375	35.41875	0.00316289	0.003594069
最終P2(V1+V2)	2.71					
初期 P1V1+2.6432*325	3.505	-1.875	-6.01875	29.4	0.00262542	0.002983343
最終P2(V1+V2)	3.21					
初期 P1V1+2.6432*325	3.995	-2.625	-9.725625	19.674375	0.00175692	0.001996462
最終P2(V1+V2)	3.705					
初期 P1V1+2.6432*325	5.03	-124.125	-588.3525	-568.67813	-0.050783	-0.05774123
最終P2(V1+V2)	4.74					
初期 P1V1+2.6432*325	5.975	-1.875	-10.340625	-579.01875	-0.0517064	-0.05879179
最終P2(V1+V2)	5.515					
初期 P1V1+2.6432*325	6.505	-0.75	-4.60125	-583.62	-0.0521173	-0.05925926
最終P2(V1+V2)	6.135					
初期 P1V1+2.6432*325	7.5	-1.125	-7.86375	-591.48375	-0.0528195	-0.06005821
最終P2(V1+V2)	6.99					
初期 P1V1+2.6432*325	8.67	-6	-48.3	-639.78375	-0.0571327	-0.06496569
最終P2(V1+V2)	8.05					
初期 P1V1+2.6432*325	9.3	0.75	6.6225	-633.16125	-0.0565413	-0.06429279
最終P2(V1+V2)	8.83					
初期 P1V1+2.6432*325	10.535	-2.625	-25.9875	-659.14875	-0.058862	-0.06693339
最終P2(V1+V2)	9.9					
初期	12.12	-16.5	-186.6975	-845.84625	-0.0755341	-0.08590791

【表７－３】

表7:Liを用いたTHF実験3

		減少したpv	吸収した H2 ml			
P1V1+2.6432*325						
最終 P2(V1+V2)	11.315					
初期 P1V1+2.6432*325	12.12	946.875	9696	8850.15375	0.79031873	0.890095611
最終 P2(V1+V2) 16時間	10.24					

【０１８４】

水素中のリチウムによる水素吸収は、図２の図におけるトレース（２４０）によって示され、ｙ軸に向かうH_2吸収の圧力低下を約１１ａｔｍまで示さない。約１１ａｔｍを超える最終水素圧力が導入される場合、バラトロンゲージの圧力は緩やかに低下し、少量の水素ガスが、カリウム及びＴＨＦ混合物中に吸収されたことを示す。約１８時間後、最終圧力を測定し、更なる水素を、ＴＨＦのみを含んだ反応器に約１０ａｔｍまで導入した。

【０１８５】

例８：溶媒和電子溶液中に含まれる金属ハライド有機錯体からの水素放出

例６及び７に記載した、ＳＥＳ中に貯蔵された水素は、本明細書で例示する手順に従って、ＳＥＳ内の金属ヒドリド有機錯体から放出され得る。

【０１８６】

適当な温度は、溶媒の融点及び沸点の範囲内である。ＴＨＦの場合、これらの温度は、それぞれ－１０８．４℃及び６６℃である。双方の温度は、ＳＥＳ（ＯＲＭ）の形成のために変化し得ることが予測される。基本的には、ＴＨＦ系ＳＥＳの融点は、１０８．４℃未満であり、沸点は６６℃を超えるはずである。これらの温度データは、現在利用することができず、公開されている文献にも見出すことができない。ＴＨＦ系ＳＥＳにおいて、より好ましい温度範囲は、－５０℃～＋５０℃であり、更により好ましいのは、－３０℃～＋４０℃である。

【０１８７】

ＴＨＦ及び他の有機溶媒は、発生の間に水素と混合し得る。水素を選択的に透過させることのできるセラミック膜を使用して、水素と溶媒分子とを物理的に分離させることが提案されている。例えば、かかる膜は、Gavalas et al. の文献［参考文献１３］及び［参考文献１４］に記載され、各々は、引用によってその全体が本明細書に組み込まれる。水素貯蔵及び発生の反応器の概略図が、図３に説明される。

【０１８８】

特に、図３の図において（３００）：水素流入パイプ、（３１０）：水素侵入ストッパー、（３２０）：溶媒和電子溶液又は金属有機ラジカル、（３３０）：水素貯蔵反応器、（３４０）：水素選択的透過膜、（３５０）：水素漏出ストッパー及び（３６０）水素排出パイプである。

【０１８９】

ＬｉＨからの水素放出に関連して行われる実験では、１８０ＫＪ／ｍｏｌのH_2が必要とされる。試料は９００℃まで加熱した。

【０１９０】

例９：溶媒和電子溶液並びに有機金属溶液中での水素貯蔵及び放出

Ｈ２貯蔵は、１段階又は多段階プロセスで行われ得る。図３のパイプ（３００）は、水素タンクに連結され、且つ、ストッパー（３５０）が閉まっている間、ストッパー（３１０）は開いている。１段階プロセスでは、ＳＥＳ又は有機金属溶液を含んだ反応器に、あ

る圧力Ｐ１まで水素を充填する。水素がＳＥＳ又は有機金属溶液と反応した後、圧力は、Ｐ２＜Ｐ１へと安定化される。多段階プロセスでは、圧力が、ほぼＰ２の平衡に達した後、最大で例えばＰ１まで、より多くの水素が添加され、次いで、水素は、再び、ＳＥＳ／有機金属溶液と反応し、その後、平衡圧力Ｐ３に達する。プロセスは、例えば、Ｐ１での水素飽和まで繰り返される。

【０１９１】

一旦、水素漏出ストッパー（図３中の構成要素（１５０））及びストッパー（３１０）が閉じられると、水素は、例えば、初期圧力Ｐ２（１段階）又はＰ１（多段階）から放出され得る。

【０１９２】

例１０：溶媒和電子溶液中での水素発生

ＳＥＳ含有金属ヒドリド有機錯体と水又はアルコールとを、２つの別々のコンパートメントに貯蔵し、制御した大気条件下で混合し、水素を発生させた。

【０１９３】

特には、図４に概略的に示す通り、アルゴンを満たしたグローブボックス中で、１０ｃｍ^{3}のリチウム－ナフタレン－ＴＨＦのＳＥＳ（例３の溶液１（１：１：１２．３３））をガラス反応器に導入した。

【０１９４】

図４の略図において、反応器は、（４００）：水（アルコール）タンク、（４１０）：水ストッパー、（４２０）：溶媒和電子溶液又は金属有機ラジカル、（４３０）：水素貯蔵反応器、（４４０）：水素選択的透過膜、（４５０）：水素漏出ストッパー及び（４６０）：水素排出パイプを具備する。

【０１９５】

水素選択的透過膜（４４０）は使用しなかった。磁気攪拌子をＳＥＳ（４２０）中に導入し、そして、システムは、反応器の上部に、ｉ／２つの円筒形排気筒を具備した円錐形ゴム系密封キャップ、及び、ｉｉ／タンク（４００）とストッパー（４１０）とパイプ（４１５）とを具えた、水（アルコール）導入システムを具備する。パイプ（４１５）は、第１キャップ排気筒の内部に密封されてつながっている。ストッパー（４１０）を閉じ、ｉｉｉ／水素排出系は、ストッパー（４５０）及び排出パイプ（４６０）を含んでいる。排出パイプ（４６０）は、第２キャップ排気筒の内部に密封されてつながり、ストッパー（４５０）が閉められた。

【０１９６】

次いで、反応器システムをグローブボックスから取り出し、外気雰囲気に曝露した。タンク（４００）は、水で満たされた。強力な磁気的攪拌の下、ストッパー（４５０）を閉めたまま、ストッパー（４１０）により、水を、非常にゆっくりと、且つ、慎重に導入した。このすぐ後に、ＳＥＳと水との反応から気泡が形成された。ストッパー（４１０）を閉じ、次いで、マッチの炎を排出パイプ（４６０）の端にかざし、そして、ストッパー（４５０）を注意深く開けた。マッチを消した後でさえも、排出ガス端で炎が見られた。マッチの炎が排出パイプの末端に近づくと、時折、短く軽い音を聞くことができた。炎と軽く短い音とは、空気中での制御された水素の燃焼に特徴的である。事実、反応器内での酸素の不足は、致命的な爆発条件が生ずるのを防ぐ。

【０１９７】

上記と同様の実験を、水の代わりにエタノールを使用して行なった。同様の結果が得られ、特に水素が形成された。

【０１９８】

例１１：有機金属溶液中での水素貯蔵及び放出

ブチルリチウム１Ｍのヘキサン溶液１００ｍｌを図３に示す反応器中で使用した。ストッパー３５０を閉じたまま、反応器を、水素で約１０ａｔｍまで加圧した。ストッパー３１０を閉じた。反応器中の圧力は、徐々に低下し、水素がＭＯＲ溶液に貯蔵されたことを示した。計算された貯蔵水素の量は、３重量％～５重量％の範囲である。

【０１９９】
ストッパー３５０を開けた後、反応器中の圧力が低下することにより、ＭＯＲ溶液から水素が発生した。
【０２００】
例１２：有機金属溶液中での水素発生
第１の実験セットにおいて、ブチルリチウム１Ｍのヘキサン溶液１００ｍｌを、図４の反応器内で使用した。タンク４００を水で満たした。ＭＯＲ溶液を磁気によって攪拌した。ストッパー４００を開けることによって水を徐々に導入した。水素の気泡がすぐに現れ、例１０のような火炎試験によって証明された。
【０２０１】
第２の試験セットにおいて、ブチルリチウム１Ｍのヘキサン溶液１００ｍｌを、図４の反応器内で使用した。タンク４００をエタノールで満たした。ＭＯＲ溶液を磁気的に攪拌した。ストッパー４００を開けることによりエタノールを徐々に導入した。水素の気泡がすぐに現れ、例１０のような火炎試験によって証明された。
まとめると、本開示のいくつかの態様において、電子供与体及び電子受容体を適当な溶媒中に含んだ水素貯蔵及び／又は発生配合並びに組成物が記載され、そして、水素を貯蔵及び／又は発生させる関連する方法並びにシステムが説明される。
【０２０２】
上記例は、当業者に、本開示の配合、装置、組成物、システム及び方法の態様をどのように作製し、使用するかについて、完全な開示及び記載を与えるために提供され、発明者が彼らの開示とみなすものの範囲を制限することを意図しない。明細書に示す全ての特許及び公開は、本開示に関連する当業者の技術水準を示す。
【０２０３】
背景技術、発明の概要、発明を実施するための形態及び実施例において引用される各々の文献の開示全体（特許、特許公開、学術論文、要約、実験マニュアル、書籍又は他の開示を含む）は、引用によって、本明細書に組み込まれる。本開示で引用される全文献は、個々にその全体が引用によって組み込まれる場合と同程度に、引用によって組み込まれる。しかしながら、引用文献及び本開示との間で矛盾が生ずる場合には、本開示が優先される。
【０２０４】
本明細書中で使用される用語や表現は、制限の用語としてではなく、説明の用語として使用されており、かかる用語や表現の使用に、示されていたり説明されていたりする特徴又はそれらの部分の均等物を排除する意図はないが、請求される開示の範囲内で種々な変更は可能であることが認識される。従って、本開示は、好ましい態様、典型的な態様及び任意の特徴によって具体的に開示されているが、本明細書で開示される概念の修正及び変更は、当業者によって頼りにされる可能性があり、そして、係る修正及び変更は、添付の特許請求の範囲で規定する通り、本開示の範囲内と認められることが理解されるべきである。
【０２０５】
更に、本明細書で使用する専門用語は、特定の態様の説明のみを目的としており、限定することを意図していないことが理解されるべきである。本明細書及び添付の特許請求の範囲で使用する通り、単数形「ａ」「ａｎ」及び「ｔｈｅ」には、明確に他の内容を示さない限り、複数の指示対象が含まれる。「複数」の語には、明確に他の内容を示さない限り、２以上の指示対象が含まれる。別の方法で定義しない限り、本明細書で使用する技術用語及び科学用語の全ては、本開示が関連する分野の当業者によって通常理解されるのと同様の意味を有する。
【０２０６】
マーカッシュグループ又は他のグループ化を本明細書中で使用するとき、当該グループの個々の要素全て、グループの組合せ全て、及び、可能性のある副組合せが、本開示の中に独立して個別に含まれることが意図される。本明細書で記載又は例示される構成要素若

しくは物質のあらゆる組み合わせは、特に明記しない限り、本開示を実施するために使用される。当業者は、明確に例示されたもの以外の方法、装置の構成要素及び物質を、過度の実験に頼ることなく本開示の実施に採用することができることを理解するであろう。かかる方法、装置の構成要素及び物質の、当該分野で既知の機能的均等物は、本開示に含まれることが意図される。範囲、例えば、温度範囲、周波数範囲、時間範囲又は組成範囲を明細書に示す場合はいつでも、中間の範囲及び副範囲の全て並びに示される範囲内の個々の値全てが、本開示に含まれることが意図される。本明細書で開示した範囲又はグループの任意の１以上の個々のメンバーは、本開示の特許請求の範囲から除かれてもよい。本明細書で説明的に記載する開示は、本明細書で具体的に開示されていない任意の要素又は限定の非存在下で適当に実施することができる。

【０２０７】

本開示の種々の態様を説明した。本明細書に示される特定の態様は、本開示の有用な態様の例であり、当該開示は、本明細書に示す装置、装置構成要素、方法の工程の多数の変更を用いて実施され得ることは当業者に明らかである。当業者に明らかである通り、本発明の方法に有用な方法に有用な及び装置には、多数の任意の組成、プロセスの要素及び工程が含まれ得る。

【０２０８】

特に、本開示の精神及び範囲から逸脱することなく種々の変更がなされ得ることが理解される。従って、他の態様も、下記の特許請求の範囲の範囲内である。

【０２０９】

参考文献

[参考文献１] P. P. Edwards, Adv. Inorg. Chem. 1982年, 25, 第135- 185頁.
[参考文献２] P. P. Edwards, Nature 1988年, 331, 564 -565頁.
[参考文献３] P. P. Edwards, C. N. R. Rao, N. Kumar, A. S. Alexandrov, ChemPhysChem 2006年, 7, 第2015 -2021頁.
[参考文献４] W. Weyl, Ann. Phys. 1863年, 197,第 601 -612頁.
[参考文献５] C. A. Kraus, J. Am. Chem. Soc. 1908年, 30,第1323 - 1344頁.
[参考文献６] R. A. Ogg Jr. , Phys. Rev. 1946年, 69, 第668- 669頁.
[参考文献７] F. A. Uribe, K. W. Samkow, A. F. Sammell, J. Electrochem. Soc. 1989 ,139, 3558-3565
[参考文献８] R. Yazami, US Patent Application #12/612,409, 11月 4日, 2009年
[参考文献９] Q-S Li, Z-M Yi, M-G Su and X-F Sun, J. Chem. Eng. Data, 2008年, 53, 第2701-2703頁
[参考文献１０] S. Hayama; J. C. Wasse, N. T. Skipper, J. K. Walters, Molecular Physics, 2001年, 99, 第779-786頁(8)
[参考文献１１] S. D. Beattie, D. M. Manolescu, S. L. Blair, J. Electrochem. Soc, 156 1 A44-A47, 2009年
[参考文献１２] S. Li, Z.M. Yi, M.G. Su and X.F Sun J. Chem Eng Data 2008年, 53, 第2701-2703頁.
[参考文献１３] B. S. Kang and G. R. Gavalas Ind. Eng. Chem. Res. 2002年, 41, 第3145-3150頁
[参考文献１４] . R. Gavalas Ind. Eng. Chem. Res. 2008年, 47, 第5797-5811頁

【図１】

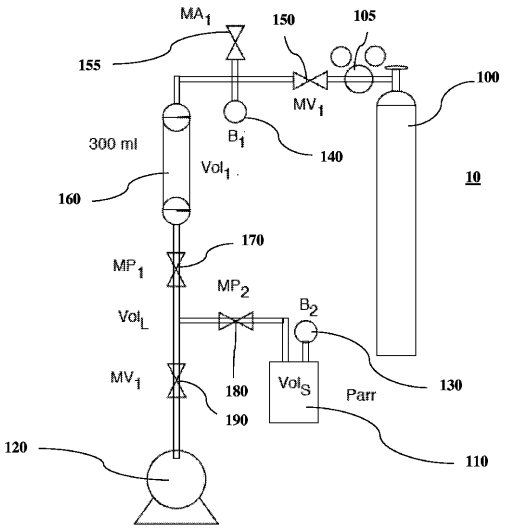
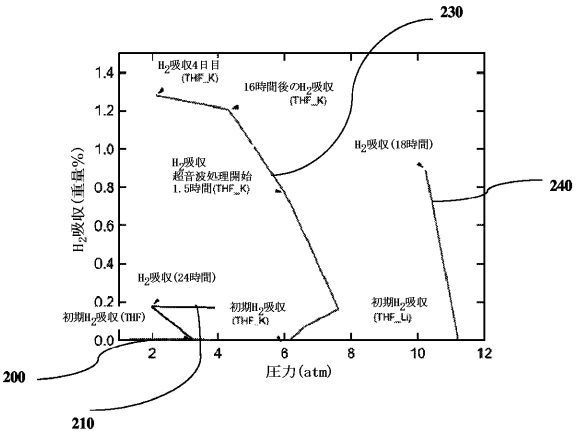
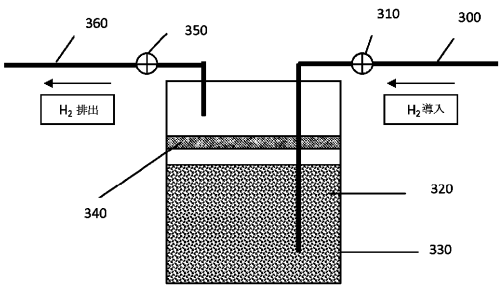


FIG. 1

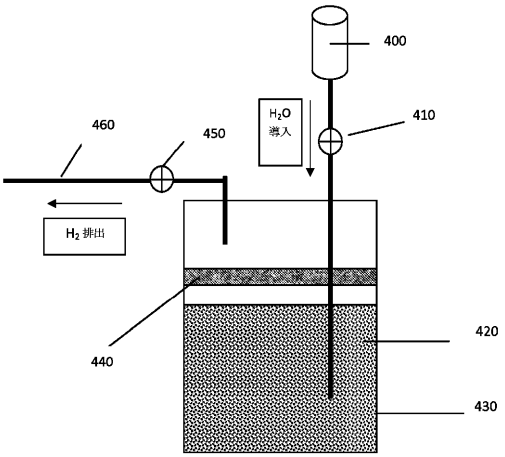
【図２】



【図３】



【図４】



【国際調査報告】

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/US2010/060359

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

C01B 3/00(2006.01)i, F17C 11/00(2006.01)i, B01J 20/22(2006.01)i

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)
C01B 3/00; B01J 20/22; C01F 5/00; C07F 5/06

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched
Korean utility models and applications for utility models
Japanese utility models and applications for utility models

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)
eKOMPASS(KIPO internal) & Keywords: hydrogen, electron donor, metal, electron acceptor, polycyclic aromatic hydrocarbon, solvent

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	US 2006-0252641 A1 (OMAR M. YAGHI et al.) 09 November 2006 See abstract, claims 1-19	1-4,7,8,19-21,23-28
A	US 2008-0188677 A1 (MARKUS SCHUBERT et al.) 07 August 2008 See claims 1, 2, 8, 12	1-4,7,8,19-21,23-28
A	US 04798718 A (BORISLAV BOGDANOVIC) 17 January 1989 See abstract, claims 1, 7	1-4,7,8,19-21,23-28
A	WO 2008-141705 A2 (UNIVERSITAT HEIDELBERG) 27 November 2008 See claim 1	1-4,7,8,19-21,23-28
A	US 2009-0227808 A1 (JONG SIK KIM et al.) 10 September 2009 See claims 1, 4	1-4,7,8,19-21,23-28

☐ Further documents are listed in the continuation of Box C. ☒ See patent family annex.

* Special categories of cited documents:
"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance
"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date
"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of citation or other special reason (as specified)
"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means
"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed
"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention
"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone
"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents,such combination being obvious to a person skilled in the art
"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search	Date of mailing of the international search report
26 SEPTEMBER 2011 (26.09.2011)	**26 SEPTEMBER 2011 (26.09.2011)**

Name and mailing address of the ISA/KR	Authorized officer
Korean Intellectual Property Office Government Complex-Daejeon, 189 Cheongsa-ro, Seo-gu, Daejeon 302-701, Republic of Korea Facsimile No. 82-42-472-7140	LEE, Young Wan Telephone No. 82-42-481-5560

Form PCT/ISA/210 (second sheet) (July 2009)

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.
PCT/US2010/060359

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member(s)	Publication date
US 2006-0252641 A1	09.11.2006	US 7662746 B2	16.02.2010
US 2008-0188677 A1	07.08.2008	AT 489353 T	15.12.2010
		CA 2618869 A1	01.03.2007
		CN 101243034 A	13.08.2008
		DE 102005039654 A1	01.03.2007
		DE 502006008393 D1	05.01.2011
		EP 1917228 A1	07.05.2008
		EP 1917228 B1	24.11.2010
		JP 2009-504797 A	05.02.2009
		JP 2009-504797 T	05.02.2009
		KR 10-2008-0038191 A	02.05.2008
		US 7842827 B2	30.11.2010
		WO 2007-023119 A1	01.03.2007
US 04798718 A	17.01.1989	EP 0003564 A1	22.08.1979
		EP 0003564 B1	07.04.1982
		EP 0111923 A2	27.06.1984
		EP 0111923 B1	08.02.1989
		EP 0112548 A2	04.07.1984
		EP 0112548 B1	13.09.1989
		EP 0147581 A1	10.07.1985
		EP 0147581 B1	01.02.1989
		EP 0316968 A2	24.05.1989
		EP 0316968 B1	24.06.1992
		JP 03-031773 B	08.05.1991
		JP 05-009364 B	04.02.1993
		JP 1571090 C	25.07.1990
		JP 1668315 C	29.05.1992
		JP 54-112799 A	03.09.1979
		JP 59-131503 A	28.07.1984
		JP 59-174501 A	03.10.1984
		JP 60-116732 A	24.06.1985
		JP 63-046001 B	13.09.1988
		US 04554152 A	19.11.1985
		US 04554153 A	19.11.1985
		US 04659373 A	21.04.1987
		US 04695446 A	22.09.1987
		US 04731203 A	15.03.1988
		US 04749558 A	07.06.1988
		US 04957727 A	18.09.1990
		US 05069894 A	03.12.1991
		US 05162108 A	10.11.1992
		US 05199972 A	06.04.1993
WO 2008-141705 A2	27.11.2008	DE 102007024145 B3	27.11.2008
		EP 2160353 A2	10.03.2010
		US 2010-0172825 A1	08.07.2010
		WO 2008-141705 A3	27.11.2008

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.
PCT/US2010/060359

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member(s)	Publication date
US 2009-0227808 A1	10.09.2009	CN 101525345 A	09.09.2009
		EP 2098530 A1	09.09.2009
		JP 2009-215291 A	24.09.2009
		KR 10-0960355 B1	28.05.2010
		KR 10-2009-0095245 A	09.09.2009
		TW 200946540 A	16.11.2009
		US 7790911 B2	07.09.2010

Form PCT/ISA/210 (patent family annex) (July 2009)

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/US2010/060359

Box No. II Observations where certain claims were found unsearchable (Continuation of item 2 of first sheet)

This international search report has not been established in respect of certain claims under Article 17(2)(a) for the following reasons:

1. ☐ Claims Nos.:
because they relate to subject matter not required to be searched by this Authority, namely:

2. ☒ Claims Nos.: 11-14
because they relate to parts of the international application that do not comply with the prescribed requirements to such an extent that no meaningful international search can be carried out, specifically:

Claims 11-14 refer to claim 10. However, claim 10 does not comply with PCT Rule 6.4(a), and thus it is not searchable, nor are its dependent claims 11-14.

3. ☒ Claims Nos.: 5, 6, 9, 10, 15-18, 22
because they are dependent claims and are not drafted in accordance with the second and third sentences of Rule 6.4(a).

Box No. III Observations where unity of invention is lacking (Continuation of item 3 of first sheet)

This International Searching Authority found multiple inventions in this international application, as follows:

1. ☐ As all required addtional search fees were timely paid by the applicant, this international search report covers all searchable claims.

2. ☐ As all searchable claims could be searched without effort justifying an additional fee, this Authority did not invite payment of any additional fee.

3. ☐ As only some of the required additional search fees were timely paid by the applicant, this international search report covers only those claims for which fees were paid, specifically claims Nos.:

4. ☐ No required additional search fees were timely paid by the applicant. Consequently, this international search report is restricted to the invention first mentioned in the claims; it is covered by claims Nos.:

Remark on Protest

☐ The additional search fees were accompanied by the applicant's protest and, where applicable, the payment of a protest fee.
☐ The additional search fees were accompanied by the applicant's protest but the applicable protest fee was not paid within the time limit specified in the invitation.
☐ No protest accompanied the payment of additional search fees.

フロントページの続き

(81)指定国 AP(BW,GH,GM,KE,LR,LS,MW,MZ,NA,SD,SL,SZ,TZ,UG,ZM,ZW),EA(AM,AZ,BY,KG,KZ,MD,RU,TJ,TM),EP(AL,AT,BE,BG,CH,CY,CZ,DE,DK,EE,ES,FI,FR,GB,GR,HR,HU,IE,IS,IT,LT,LU,LV,MC,MK,MT,NL,NO,PL,PT,RO,RS,SE,SI,SK,SM,TR),OA(BF,BJ,CF,CG,CI,CM,GA,GN,GQ,GW,ML,MR,NE,SN,TD,TG),AE,AG,AL,AM,AO,AT,AU,AZ,BA,BB,BG,BH,BR,BW,BY,BZ,CA,CH,CL,CN,CO,CR,CU,CZ,DE,DK,DM,DO,DZ,EC,EE,EG,ES,FI,GB,GD,GE,GH,GM,GT,HN,HR,HU,ID,IL,IN,IS,JP,KE,KG,KM,KN,KP,KR,KZ,LA,LC,LK,LR,LS,LT,LU,LY,MA,MD,ME,MG,MK,MN,MW,MX,MY,MZ,NA,NG,NI,NO,NZ,OM,PE,PG,PH,PL,PT,RO,RS,RU,SC,SD,SE,SG,SK,SL,SM,ST,SV,SY,TH,TJ,TM,TN,TR,TT,TZ,UA,UG,US,UZ,VC,VN,ZA,ZM,ZW

（特許庁注：以下のものは登録商標）
１．テフロン

(74)代理人 100150360
弁理士 寺嶋 勇太
(74)代理人 100183519
弁理士 櫻田 芳恵
(72)発明者 ラチッド ヤザミ
シンガポール国 ６３９７９８ シンガポール ナヤング アヴェニュー ナンバー５０ レベル１ １－０１－２０ ビーエルケー エヌ４

Ｆターム(参考) 3E172 AA02 AA03 AA09 AB01 BA09 BB04 BB12 BB17 EA02 EA22
FA07
4G140 AA22 AA34 AA42 DA03 DB05 DC05